HAL
open science

Etude expérimentale et modélisation cinétique de l'oxydation, l'auto-inflammation et la combustion de carburants Diesel et bio-Diesel

Helena Ramirez Lancheros

To cite this version:

Helena Ramirez Lancheros. Etude expérimentale et modélisation cinétique de l'oxydation, l'auto-inflammation et la combustion de carburants Diesel et bio-Diesel. Autre. Université d'Orléans, 2012. Français. NNT : 2012ORLE2004 . tel-00717701

HAL Id: tel-00717701

https://theses.hal.science/tel-00717701v1

Submitted on 29 Aug 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse

Présentée à

L'UNIVERSITE D'ORLEANS

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE D'ORLEANS

Discipline : Cinétique chimique appliquée à la combustion

par

HELENA P. RAMIREZ L.

Etude expérimentale et modélisation cinétique de l'oxydation, l'auto-inflammation et la combustion de carburants Diesel et bio-Diesel.

Soutenue publiquement le 27 Janvier 2012 devant le jury composé de :

J.-F. PAUWELS	Rapporteur	Professeur des universités, Lille I
D. PUECHBERTY	Rapporteur	Professeur des universités, INSA Rouen
N. CHAUMEIX	Examinateur	Directrice de recherche CNRS, Orléans
P. DAGAUT	Directeur de thèse	Directeur de recherche au CNRS, Orléans
G. DAYMA	Co-encadrant	Maître de conférences, Université d'Orléans
G. MOREAC	Co- encadrant	Ingénieur de recherche Renault, Guyancourt
P. ROTH	Examinateur	Professeur, Université Duisburg-Essen
C. MORIN	Examinateur	Professeur, Université de Valenciennes

A Benjamin, mi gatito,
A Jorge, Amparo, Monchis y Julián,

Avant-propos

Cette étude a été réalisée au laboratoire de l'Institut de Combustion Aérothermique Réactivité et Environnement (ICARE) du CNRS d'Orléans. Elle a été financée par l'Association National de la Recherche et la Technologie (ANRT) sous la forme de thèse CIFRE par Renault s.a.

Je tiens à remercier mon directeur de thèse M. Philippe DAGAUT pour son soutien, sa confiance, ses idées et ses connaissances dont j'ai bénéficié pendant tout ce projet. Je remercie également Mme Gladys MOREAC-NJEIM qui a co-encadré avec beaucoup d'attention le développement de ces travaux de thèse et sans qui ce travail n'aurait été possible.

Un grand merci à Mme Nabiha CHAUMEIX, Mme Laure PILLIER et M. Guillaume DAYMA pour leurs inestimables contributions intellectuelles à ce projet. J'adresse toute ma reconnaissance aux professeurs PAUWELS, PUECHBERTY, ROTH et MORIN pour avoir examiné ce manuscrit de thèse.

I have to thank Prof. Dr. Christof Schulz and Dr. M. Fikri for hosting me at IVG lab - Duisburg University and making available the shock tube to this project. Thanks are also due to Dr. L.R. Cancino and Nathascha Schlösser for providing experimental support for the shock tube measurement. Special gratitude to all other members of the IVG lab. Without their continuous support and help received, it wouldn't have been possible to carry-out this part of work.

I am very grateful to Dr. (Pascalito) Dievart at Princeton University for the mechanism reduction methodology and intellectual contribution to this part of the work. Thanks also to Dr. Jonathan Castro for accepting our deal of my salsa lessons for his help in publications.

Merci aussi à tous ceux que j'ai rencontré durant ces 3 ans: Kamal mon bras droit pendant la première année, Valérie avec qui j'ai partagé mon bureau, Casimir toujours disponible pour aider, Amir, Julien, Alexis, Kodjo, on a soutenu ensemble, Jules, mon dépanneur, Marie la fashioniste et tout le personnel d'ICARE avec qui j'ai bavardé, histoire de décompresser un peu.

Tengo que agradecer igualmente a todos mis amigos hispánicos por los almuerzos terapéuticos de los viernes y las saliditas de los findes: Juanito y su buen humor, Indira y su oficina colombiana de turismo, Yeny siempre seria y coherente, Mauri mi psicólogo, Nani mi amiga "médaille de bronze CNRS", Leire y su resistencia al alcohol, Roxy y la taza de té de las 4pm. Gracias amigos por haberme recargado las baterías en todo momento.

Finalmente gracias a mi familia por su apoyo moral y a mi gatito por ocuparse de las correcciones en francés y de la cocina durante la realización de esta disertación.

Sommaire

Introduction ***1***

Chapitre 1. ..... ***5***

Les biocarburants ***5***

1.1 Contexte actuel 5

1.2.1 Filière bioéthanol **6**

1.2.2 Filière bio-Diesel (EMHV - ester méthylique d'huile végétale) **8**

1.3 Le cadre législatif européen 10

1. 3.1 Réduction des émissions CO_2 des véhicules légers **10**

1.3.2 Les normes antipollution **12**

1.3.3 L'incorporation des biocarburants dans les carburants fossiles **12**

1.4 L'offre et la demande 14

1.5 L'avenir des biocarburants 17

1.5.1 Les biocarburants de 1ère génération **17**

1.5.2 Les biocarburants de 2ème génération **19**

1.5.3 Les biocarburants de 3eme génération **20**

Perspectives ***23***

Chapitre 2. ..... ***25***

Combustion du Gazole contenant du Bio-Diesel ***25***

2.1 Généralités physico-chimiques des réactifs de départ. 26

2.1.1 Composition chimique du gazole **26**

2.1.2 Composition chimique du bio-Diesel **28**

2.2 Composition chimique d'un gazole contenant du bio-Diesel 32

2.2.1 Composition d'un mélange par famille chimique **32**

2.2.2 Composition d'un mélange en fonction du nombre d'atomes de carbone **33**

2.3 Effet de la structure moléculaire des esters d'acides gras sur la combustion du gazole 33

2.4 Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures 36

2.4.1 Mécanisme d'oxydation à basses températures **36**

2.4.2 Mécanisme d'oxydation à hautes températures **39**

2.5 Composés purs utilisés comme carburant modèle 41

2.5.1 Oxydation du *n*-décane **44**

2.5.2 Oxydation du 1-méthylnaphtalène **46**
2.5.3 Oxydation des esters méthyliques **48**
2.5.4 Oxydation des mélanges *n*-décane/ 1-méthylnaphtalène **50**
Applications de la Cinétique Chimique Détaillée ***53***
Conclusion ***56***
Chapitre 3 ..... ***57***
Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de gazole, bio-Diesel B30 et de carburants modèles en réacteur auto-agité. ***57***
3.1 Description du réacteur auto-agité JSR 57
3.1.1 Principe de fonctionnement **58**
3.1.2. Techniques d'analyse des gaz **60**
3.2 Méthodologie 61
3.3 Résultats expérimentaux 63
3.3.1 Oxydation du gazole commercial **64**
a) Conditions expérimentales *64*
b) Résultats expérimentaux *65*
3.3.2Oxydation du B30 réel **69**
a) Conditions expérimentales *69*
b) Résultats expérimentaux *70*
3.3.3 Oxydation du carburant modèle de type gazole (70%*n*-décane+30% 1-méthylnaphtalène) **75**
a) Conditions expérimentales *75*
b) Résultats expérimentaux *76*
3.3.4 Oxydation du carburant modèle de type B30 (49%*n*-décane / 21% 1-méthylnaphtalène / 30% octanoate de méthyle) **83**
a) Conditions expérimentales *83*
b) Résultats expérimentaux *84*
3.3.5 Comparaison des cinétiques d'oxydation du carburant réel et du carburant modèle **91**
a) Oxydation du gazole réel par rapport au carburant modèle de type gazole *91*
b) Oxydation du B30 réel par rapport au carburant modèle de type B30 ..... *93*
3.3.6 Influence de la richesse sur la réactivité de carburant. **95**
3.3.7 Influence de la pression sur l'oxydation des carburants **96**
3.4 Développement et validation du modèle cinétique d'oxydation du gazole 98
3.4.1 Base C_0-C_4 ..... **98**
3.4.2 Le sous-mécanisme d'oxydation du *n*-décane **98**
3.4.3 Le sous-mécanisme d'oxydation du 1-méthylnaphtalène **100**

3.4.4 Construction du mécanisme d'oxydation du carburant modèle de type gazole (70%n-décane+30% 1-méthylnaphtalène) 101

3.4.5 Influence des modifications apportées : réactions d'interaction 102

3.4.6 Simulations en réacteur auto-agité 105

a) Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité 105

3.5 Développement et validation du modèle cinétique d'oxydation du carburant de type B30 113

3.5.1 Le sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle 113

3.5.2 Construction du mécanisme d'oxydation du carburant modèle de type bio-Diesel(49%*n*-décane /21% 1-méthylnaphtalène/30% octanoate de méthyle) 114

a) Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité 114

b) Analyse de sensibilité 120

c) Analyse de voies réactionnelles 121

Conclusion 124

Chapitre 4 125

Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de carburants modèles en tube à choc 125

4.1 Le tube à choc 125

4.1.1 Principe de fonctionnement d'un tube à choc 125

4.1.2 Théorie de l'onde de choc- Physique de l'onde de choc 127

a) Calcul des paramètres derrière l'onde de choc incidente : 128

b) Calcul des paramètres derrière l'onde de choc réfléchie 129

4.1.3 Description du tube à choc avec système de chauffage du laboratoire IVG 130

4.2 Méthodologie 131

4.2.1 Incertitudes liées aux expériences en tube à choc 131

4.2.2 Préparation du mélange et injection dans la section à basse pression 132

4.2.3 Calculs du délai d'auto-inflammation 132

4.3 Résultats expérimentaux 133

4.3.1 Etude des délais d'auto-inflammation du carburant modèle type B30 dans l'air. 133

a) Conditions expérimentales 133

b) Résultats expérimentaux 134

c) Influence de la richesse 136

d) Influence de la pression 136

4.4 Modélisation 138

4.4.1 Influence des modifications apportées 138

c) Réévaluation des constantes de vitesse 138

d) Ajout de nouvelles réactions 139

b) Effet des changements apportés sur les prédictions en JSR 143

4.4.2 Confrontation modèle-expérience en tube à choc 144

Conclusion 156

Chapitre 5 157

Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de carburants modèles en flammes laminaires pré-mélangées 157

5.1 Régimes de propagation de flamme. 157
5.2 Structure d'une flamme de pré-mélange 157
5.2.1 Théorie thermique : Loi de Mallard et Le Châtelier 158
5.2.2 Modèle de diffusion Thermique et massique : Zeldovich, Frank-Kamenetskii et Semenov. 159
5.3 Vitesse fondamentale de flamme 159
5.4 Vitesse fondamentale de flamme à étirement nul 161
5.5 Influence des conditions initiales sur la propagation des flammes 162
5.5.1 Pression initiale 162
5.5.2 Température initiale 163
5.5.3 Influence du rapport d'équivalence 163
5.5.4 Influence de la dilution 164
5.5.5 Influence de la nature du combustible 164
5.6 La Bombe Sphérique SF2 165
5.6.1 Principe de fonctionnement 166
5.7 Méthodologie 167
5.8 Résultats expérimentaux 170
5.8.1 Conditions expérimentales 170
5.8.5 Carburant type IDEA-fuel : 70%mol *n*-décane-30%mol 1-méthylnaphtalène 171
a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar 171
b) Résultats obtenus à une pression initiale de 4 bar 175
5.8.6 Carburant modèle type B30: 49%mol n-décane-30%mol octanoate de méthyle-21%mol 1-méthylnaphtalène 177
a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar 177
b) Résultats obtenues à une pression initiale de 4 bar 180
5.9 Analyses de résultats 183
5.9.1 Effet de la pression initiale sur la vitesse de flamme des carburants modèles 183
a) Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle gazole 183
a) Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle B30 184
5.10 Modélisation 185
5.10.1 Réduction et validation du modèle cinétique d'oxydation 185
a) Régime à basse température 185
b) Régime à haute température-Méthode PFA (path flux analysis) 185
5.10.2 Confrontation modèle-expérience en bombe sphérique *SF2* 188

a) Modélisation des vitesses de flamme n-décane-air *188*
b) Carburant modèle type gazole (IDEA-fuel) dans l'air *188*
c) Carburant modèle type B30 dans l'air *189*
Conclusion ***190***
Conclusions et perspectives ***191***
Références bibliographiques ***194***
Annexe 1 ..... ***204***
Annexe 2 ..... ***208***

Liste de Figures

Figure 1. Schéma thermique et biologique pour la production de bioéthanol. *The Royal Society 2008*. 7
Figure 2. Relation entre le taux de bioéthanol et la pression de vapeur pour des mélanges essence/bioéthanol (*Source : basé sur les données fournies par J. Bennett, Ford Motor Company 2007*). 8
Figure 3. Transestérification d'un triglycéride par le méthanol (CH_3OH). 9
Figure 4. Procédé de fabrication d'EMHV. (Source *: DGEMP*) 9
Figure 5. Evolution du parc automobile mondial. Une croissance tirée par les pays en voie de développement. (*Source : TOTAL,* Mosconi 2006) 11
Figure 6. Evolution des émissions mondiales de CO_2 et prévisions à l'horizon 2030. Mosconi 2006 11
Figure 7. Taux d'incorporation de biocarburants. Cadre législatif : cas de la France (Bénézit 2007) 13
Figure 8. Consommation mondiale d'énergie dans le transport routier en 2006. (Source : *IFP*) 14
Figure 9. Production mondiale de biocarburant (en Mt). (*Source : F.O. Licht, Christoph Berg, présentation au World Biofuels 2006, Seville*). 15
Figure 10. (a) Consommation de biocarburants destinés au transport dans l'Union européenne en 2010, (b) Comparaison de l'évolution de la consommation européenne de biocarburant (en tep) entre 2003 et 2010 avec les objectifs de la directive sur les biocarburants (2003/30/EC − *Source EurObserv'ER 2010*). 16
Figure 11. Evolution du prix en dollars (a) par baril de pétrole et (b) par tonne de maïs jaune (source *: Conseil Monétaire Centre-américain*) et (c) par tonne de huile de palme (source : index mundi). 18
Figure 12. Biocarburants de deuxième génération. (*Source : TOTAL /ENERZINE*) 19
Figure 13. Vue microscopique de micro algues (source www.devicedaily.com) 21
Figure 14. Algues cultivés dans des eaux usées (source : News Center Department of Energy) 22
Figure 15. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un gazole commercial (*source Total*) 27
Figure 16. Glycerol tri-2-éthylhexanoate 28
Figure 17. Composition des bio-Diesels en fonction de sa matière première (source DOE/GO-102006-2358 Third Edition September 2006). 29
Figure 18. Exemple de l'apparence optique d'un gazole fossile et ses mélanges avec du bio-Diesel (JME : Jatropha Methyl Ester). Schönborn 2009 30
Figure 19. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un B10 commercial (*source SGS*). 33
Figure 20. Analyse détaillée des hydrocarbures composant un carburant B10. Distribution par famille chimique (*source SGS/RENAULT*). 33
Figure 21. Emission des particules (a) en fonction du nombre d'insaturation sur la chaîne carbonée et (b) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique d'huile de colza (RME). 34
Figure 22. Emission de NOx (a) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique d'huile de colza (RME) et (b) en fonction de la température de flamme adiabatique de différents esters d'acides gras. Schönborn 2009 35
Figure 23. Voies de réaction à base température (Griffiths *et al.* 1995). 37
Figure 24. (a)Variation de la concentration du carburant en fonction de la température mettant en évidence l'évolution des mécanismes d'oxydation avec la température. (b) Fraction brûlée du carburant et dégagement d'énergie en fonction du degré vilebrequin (Alséda 2007). 39
Figure 25. Voies de réaction à hautes températures (Griffiths *et al.* 1995). 39
Figure 26. Molécule de *n*-décane 44
Figure 27. Molécule d' 1-méthylnaphtalène 46
Figure 28. Schéma représentatif d'une molécule d'octanoate de méthyle 48
Figure 29. Comparaison des pressions obtenues pour un gazole et un IDEA-fuel. Barths *et al.* 1999. 51

Figure 30. Concentration dans les gaz d'échappement de a) NOx et b) Suie pour différents carburants. Barths *et al.* 1999. 51
Figure 31. Consolidation d'un mécanisme détaillé pour la combustion des carburants de type gazole. 54
Figure 32. Réacteur auto-agité par jets gazeux (ou Jet Stirred Reactor, JSR). 58
Figure 33. Feuille de calcul Excel des débits d'azote, d'oxygène et de carburant, pour un mélange stœchiométrique de carburant modèle type gazole à 10 bar. 62
Figure 34. Evolution de la formation des espèces en fonction de la température lors de l'oxydation du carburant modèle de type gazole (70% de *n*-décane+30% 1-méthylnaphtalène). 63
Figure 35. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 66
Figure 36. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 67
Figure 37. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 68
Figure 38. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 69
Figure 39. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 71
Figure 40. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 72
Figure 41. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06% 73
Figure 42. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 74
Figure 43. Composition du carburant modèle type gazole ou IDEA-fuel : 70% $_{mol}$ de *n*-décane et 30%$_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène. 75
Figure 44. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 77
Figure 45. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 78
Figure 46. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 79
Figure 47. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1% ... 80
Figure 48. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=6 bar ; φ=0,5 ; τ=0.6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 81
Figure 49. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=6 bar ; φ=1,0 ; τ=0.6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 82
Figure 50. Composition du carburant modèle type B30 : 49% $_{mol}$ de *n*-décane, 21% $_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène et 30% $_{mol}$ d'octanoate de méthyle. 83
Figure 51. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 85
Figure 52. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 86
Figure 53. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 87
Figure 54. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 88
Figure 55. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=6 bar ; φ=0,5 ; τ=0,6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 89
Figure 56. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=6 bar ; φ=1,0 ; τ=0,6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 90
Figure 57. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) : φ=0,25, 10 bar etτ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 92
Figure 58. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) : φ=1, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%... 93
Figure 59. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) : φ=0,25, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 94
Figure 60. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) : φ=1, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 95

Figure 61. Influence de la richesse sur quelques espèces mesurées lors de l'oxydation en JSR du carburant modèle type B30 à 10 bar et τ=1s pour une richesse de φ=0,25 (symboles verts), φ=0,5 (symboles noirs) φ=1 (symboles bleus) et φ=1,5 (symboles rouges). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 96
Figure 62. Influence de la pression sur quelques espèces mesurées lors de l'oxydation en JSR du carburant modèle type B30 à 10 bar (symboles remplis) et 6 bar (symboles vides) pour une richesse stœchiométrique. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 97
Figure 63. Changements apportés par les réactions d'interaction sur les prédictions en JSR : modèle de départ (lignes discontinues), modèle avec les réactions d'interaction (lignes continues) et les expériences (symboles) d'oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : φ=1, 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 102
Figure 64. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=0.25, 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 107
Figure 65. . Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=0.5, 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 108
Figure 66. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=1.0 , 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 109
Figure 67. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=1.5 , 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 110
Figure 68. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=0.5 , 6bar et τ=0.6s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 111
Figure 69. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=1.0 , 6bar et τ=0.6s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 112
Figure 70. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=0,25 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 115
Figure 71. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=0,5 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 116
Figure 72. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=1 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 117
Figure 73. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=1,5 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 118
Figure 74. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 6 bar; φ=0,5 et τ=0,6s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 119
Figure 75. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 6 bar; φ=1 et τ=0,6s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. 120
Figure 76. Coefficients de sensibilité pour le *n*-décane, l'octanoate de méthyle, et le 1-méthylnaphtalène lors de l'oxydation du carburant modèle type B30 en JSR a 10 bar et φ=0,5 et 620K. 121
Figure 77. Principales voies de dégradation du carburant modèle type B30 (49/21/30 *n*-décane/1-méthylnaphtalène/octanoate de méthyle en mole) : P=10 bar , φ=1 and T=1030K. 122
Figure 78. Schéma de principe temps - distance pour un tube à choc. Zone 1- mélange de gazeux d'essai, zone 2- gaz choqués (onde de choc incidente), zone 3- gaz inertes en expansion, zone 4- gaz inertes comprimés, zone 5- gaz choqués (onde de choc réfléchie). 126
Figure 79. Fonctionnement d'un tube à choc, (a) état initial, (b) et (c) Propagation de l'onde de choc incidente, (d) et (e) propagation de l'onde de choc réfléchie (source : Cancino et al. 2009) 127
Figure 80. Schéma représentatif du tube à choc chauffé du laboratoire IVG – UDE (Allemagne). 131
Figure 81. Exemple d'un tableau caractéristique pour des expériences en tube à choc 132
Figure 82. Profils de signaux de pression et d'émission de CH* déterminant le délai d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 dans l'air à 40 bar, 916 K and φ= 1.0. 133
Figure 83. Résultats expérimentaux obtenus en tube à choc pour un carburant modèle B30. On peut noter le régime NTC au-delà de 919K : φ=0,5 (losanges), φ=1,0 (cercles) et φ=1.5 (carrés), à 20 bar (a) et 40 bar (b). 135
Figure 84. Délais d'auto-inflammation normalisés pour le carburant modèle B30 dans l'air à φ=0,5 (losanges), φ=1,0 (cercles) et φ=1.5 (carrés), et deux différents pressions 20 bar (a) et 40 bar (b). Les lignes correspondent aux corrélations d'Arrhenius. 136

Figure 85. Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation normalisé pour le carburant modèle B30 dans l'air à φ=0,5 (a), φ=1,0 (b) et φ=1.5 (c), à deux pressions, i.e. 20 bar (symboles vides) et 40 bar (symboles pleins). Les lignes représentent les corrélations d'Arrhenius. 137
Figure 86. Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation du carburant modèle type B30- (cercles) et d'un carburant modèle type gazole (Wang *et al.* 2010, triangles) à 20 bar (symboles pleins) et à 40 bar (symboles vides). Les lignes correspondent à la corrélation d'Arrhenius. 138
Figure 87. Oxydation du carburant modèle B30 en JSR : P= 10 bar, τ = 1s et φ = 1. Symboles: résultats expérimentaux. Lignes continues: mécanisme modifié, Lignes en pointillées: mécanisme précédent. 144
Figure 88. Délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle type B30 dans l'air: φ = 1.0 et 20 bar. Ligne continue : nouveau mécanisme : Ligne en pointillé ancien modèle cinétique. 145
Figure 89. Confrontation entre les délais d'auto-inflammation simulés et mesurés pour l'oxydation de carburant modèle B30 dans l'air à 20 bar. Losange : données expérimentales pour *φ* = 0.5 ; Cercles: données expérimentales pour φ = 1.0 ; Carrés: données expérimentales à φ = 1.5. Les lignes correspondent aux simulations. 145
Figure 90. Confrontation entre les délais d'auto-inflammation simulés et mesurés pour l'oxydation de carburant modèle B30 dans l'air à 40 bar. Losange: données expérimentales pour *φ* = 0.5 ; Cercles: données expérimentales pour φ = 1.0 ; Carrés: données expérimentales à φ = 1.5. Les lignes correspondent aux simulations. 146
Figure 91. Confrontation entre délais d'auto-inflammation simulés et mesurés en tube à choc pour le carburant modèle de type B30-cercles (cette étude) et le carburant modèle de type gazole-triangles (Wang *et al.* 2010) à 20 bar (symboles pleins), à 40 bar (symboles vides). Lignes continues: prédictions à 20 bar et lignes en pointillés : prédictions à 40 bar. 146
Figure 92. Analyse des principales voies réactionnelles lors de l'oxydation du B30 modèle à 640 K, 20 bar, φ=1 ; consommation du carburant : 1-méthylnaphtalène, 0,15% ; *n*-décane, 0,011% et octanoate de méthyle, 0,01%. 147
Figure 93.Analyse de sensibilité pour le carburant modèle B30 à 640 K, φ = 1, 20 bar et une consommation de 0,15% du 1-méthylnaphtalène, de 0,011% du *n*-décane et de 0,01% de l'octanoate de méthyle. 149
Figure 94. Analyse des principales voies réactionnelles lors de l'oxydation du carburant modèle type B30 à 760 K, 20 bar, φ=1 et pour une consommation de 38,98% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 13,2% de l'octanoate de méthyle. 150
Figure 95. Analyse de sensibilité pour le carburant modèle B30 à 760 K, φ = 1, 20 bar et pour une consommation du 38,98% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 13,2% de l'octanoate de méthyle. 151
Figure 96. Analyse des principales voies réactionnelles pour l'oxydation du B30 modèle à 910 K, 20 bar, φ=1 et pour une consommation de 21,69% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et 64,14% de l'octanoate de méthyle. 152
Figure 97. Analyse de sensibilité pour le B30 modèle à 910 K, φ = 1, 20 bar et une consommation de 21,69% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 64,14% de l'octanoate de méthyle. 153
Figure 98. Analyse des principales voies réactionnelles lors de l'oxydation du B30 modèle à 1210 K, 20 bar, φ=1 et pour une consommation de 19,08% du 1-méthylnaphtalène, de 45,74% du *n*-décane et de 60,71% de l'octanoate de méthyle..... 154
Figure 99. Analyse de sensibilité pour le B30 modèle à 1210 K, φ = 1, 20 bar et pour une consommation de 19,08% du 1-méthylnaphtalène, de 45,74% du *n*-décane et de 60,71% de l'octanoate de méthyle. 155
Figure 100. Structure de la flamme laminaire pré-mélangée. 158
Figure 101. Influence de la pression initiale sur la vitesse fondamentale de flamme à 298 K. Gelfand 2000. 163
Figure 102. Influence de la température initiale sur la vitesse de flamme laminaire. Kumar *et al.* 2007; Kumar *et al.* 2007. 163
Figure 103. Influence du diluant initial sur la vitesse de flamme laminaire. Qiao *et al.* 2008. 164
Figure 104. Différentes vues de la bombe sphérique utilisée durant cette étude : H_1 et H_4 hublots de visualisation de la flamme, E_1 et E_2 électrodes en tungstène, C_1 le capteur de pression, T_1 thermocouple, G_1 système d'introduction des gaz et FC_1 et FC_2 la circulation du fluide chauffant. 165
Figure 105. Vue de la seconde enveloppe de la bombe sphérique. 165
Figure 106. Dispositif de visualisation de la flamme par strioscopie laser. 166
Figure 107. Schéma du dispositif d'inflammation des mélanges. 167
Figure 108. Exemple d'évolution de la pression durant l'acquisition d'une S_l. Le combustible est le gazole modèle. 168

Figure 109. Evolution du rayon de flamme en fonction du temps. 168
Figure 110. Evolution de la pression en fonction du temps de l'octanoate de méthyle pour un intervalle de rapports d'équivalence de 0,54 à 1,25. 169
Figure 111. Evolution de la vitesse spatiale de flamme du carburant modèle type gazole en fonction de l'étirement pour quelques rapports d'équivalence. 170
Figure 112. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle gazole / air à 423 K et 1 bar de pression initiale. 173
Figure 113. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 0,59. ... 174
Figure 114. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 1,70. ... 174
Figure 115. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 2,22. ... 174
Figure 116. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle gazole / air à 423K et 4 bar de pression initiale. 176
Figure 117. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,59. . 177
Figure 118. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,73. . 177
Figure 119. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,14. . 177
Figure 120. Vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et de la longueur de Markstein (b et d) en fonction de la richesse de B30 modèle/air à 423K et 1 bar. 179
Figure 121. Images de la flamme au cours de sa propagation du B30 modèle dans l'air 1 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,61. 180
Figure 122. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 1 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,22. 180
Figure 123. Images de la flamme au cours de sa propagation dans le cas du B30 modèle dans l'air à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,51. 180
Figure 124. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des B30 modèle / air à 423K et 4 bar. 182
Figure 125. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,62. 182
Figure 126. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,97. 183
Figure 127. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,2. 183
Figure 128. Comparatif entre les évolutions de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul (a) et longueurs de Markstein (b) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle type gazole / air à 423K et 1 et 4 bar de pression initiale. 184
Figure 129. Comparatif entre les évolutions de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges de carburant modèle B30 / air à 423K et 1 et 4 bar de pression initiale. 184
Figure 130. Schéma du taux de transfert entre A et B via les autres réactifs *Mi (* Sun *et al.* 2010). 186
Figure 131. Délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 à haute température. Lignes continues avec des symboles : prédictions du mécanisme détaillé. Lignes en pointillé : prédictions du mécanisme réduit. 187
Figure 132. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les vitesses de flamme mesurées par Kumar *et al.* 2007(symboles vides) et Ji *et al.* 2010 (symboles pleins) du n-décane à 1bar et 423 K. 188
Figure 133. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les expériences (symboles et pointillés) des vitesses de flammes du gazole modèle à 1bar et 423 K. 189
Figure 134. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les expériences (symboles) des vitesses de flammes du carburant modèle B30 à 1bar et 423 K. 189

Liste de Tableaux

Tableau 1 Caractéristiques comparées du gazole et des esters méthyliques de colza. *(Source : IFP)*.....10
Tableau 2. Récapitulatif des normes européennes EURO I à EURO VI limitant les émissions de polluants à l'échappement des véhicules Diesel neufs. Emission en g.km^{-1} 12
Tableau 3. Qualité du pétrole brut (source : Secrétariat de la CNUCED) 26
Tableau 4. Propriétés physico-chimiques de l''huile de colza, de l'ester de colza et du gazole. 29
Tableau 5. Composition massique de l'ester méthylique d'huile de colza Osmont 2007 30
Tableau 6. Comparaison des propriétés de l'huile de colza, de l'ester méthylique de colza (EMC) et du Gazole (*source : RENAULT*). 31
Tableau 7. Spécifications des mélanges gazole-bio-Diesel.....32
Tableau 8. Quelques exemples de carburants modèles développées dans des modèles cinétiques. 43
Tableau 9. Oxydation du *n*-décane.....45
Tableau 10. Oxydation du 1-méthylnaphtalène. 47
Tableau 11. Oxydation des Méthyle esters 49
Tableau 12. Propriétés physico-chimique d'IDEA fuel comparées à celles du gazole.....50
Tableau 13. Oxydation des mélanges *n*-décane/ 1-méthylnaphtalène 52
Tableau 14. Propriétés physico-chimique de carburant modèle B30 comparées à celles du B30 réel 52
Tableau 15. Conditions d'utilisation des différents chromatographes (Ristori 2000). 61
Tableau 16. Conditions expérimentales étudiées en JSR. 64
Tableau 17. Conditions expérimentales de l'oxydation du gazole en réacteur auto-agité.....64
Tableau 18. Caractéristiques physico-chimiques du gazole Elf-TOTAL sans additifs.....65
Tableau 19. Conditions expérimentales de l'oxydation du B30 en réacteur auto-agité.....70
Tableau 20. Caractéristiques physico-chimiques du B30 Elf-TOTAL sans additifs 70
Tableau 21. Conditions expérimentales de l'oxydation du carburant modèle type gazole en réacteur auto-agité. 75
Tableau 22. Quelques caractéristiques physico-chimiques du carburant modèle de type gazole.....76
Tableau 23. Conditions expérimentales de l'oxydation du carburant modèle type B30 en réacteur auto-agité. 83
Tableau 24. Quelques caractéristiques physico-chimiques du carburant modèle type B30. 84
Tableau 25. Quelques nomenclatures des espèces utilisées par Dievart 2008 et adoptées dans ce travail. 100
Tableau 26. Réactions d'interaction considerées dans le schéma pour la modélisation de l'oxydation de carburants bio-Diesel/gazole [k = A T^{n} exp(-E/RT) en cal, mol, cm^{3}].....103
Tableau 27. Récapitulatif des conditions expérimentales pour l'étude en tube à choc sur l'oxydation du carburant modèle B30.....134
Tableau 28. Résultats des délais d'auto-inflammation du carburant modèle B30 dans l'air à φ=0,5, φ=1,0 and φ=1,5. 134
Tableau 29. Résumé de réévaluation des constantes de vitesse [$k = AT^{n}$ exp($-E/RT$) en cal, mol, cm^{3}, s].....139
Tableau 30. Nouvelles réactions ajoutées pour des changements à haute température. 140
Tableau 31. Nouvelles réactions ajoutées pour des changements à basse température.....141
Tableau 32. Conditions initiales étudiées au cours de ce travail.....170
Tableau 33. Résultats expérimentaux pour le gazole modèle à 1 bar et 423 K. L' : Longueur de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore). .171
Tableau 34. Résultats expérimentaux pour le gazole modèle à 4 bar et 423 K. L' : Longueur de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore). .175
Tableau 35. Résultats expérimentaux pour le B30 modèle à 1 bar et 423K. L' : longueur de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore) 178
Tableau 36. Résultats expérimentaux du carburant modèle type B30 à 4 bar et 423K. L' : nombre de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC : combustion adiabatique, isochore…181

Introduction

En dépit du fait que le premier moteur à combustion interne conçu par Henry Ford et Rudolf Diesel fonctionnait à l'époque uniquement grâce à du carburant issu de plantes, ce n'est que depuis quelques décennies que l'intérêt pour ce type de carburant n'a cessé de croitre, sous un nouveau nom : *les biocarburants*. Aujourd'hui, bien que les risques géopolitiques et environnementaux liés à la dépendance du pétrole soient évidents, le remplacement de carburants fossiles ne sera pas facile, et l'incorporation systématique des biocarburants dans les transports a déjà généré une des polémiques les plus intenses de la société moderne.

L'épuisement progressif des ressources en combustibles fossiles et les problèmes de pollution ont attiré l'attention des chercheurs vers la recherche de carburants alternatifs. En principe, avec un carburant alternatif, la disponibilité des ressources, ainsi que la réduction des émissions de polluants (CO, CO_2, NOx, suies, HC…) permettront la prolongation des réserves pétrolières d'une part, et la préservation de l'environnement d'autre part.

Les biocarburants ont gagné une place importante parmi les principales sources d'énergie primaire. Contrairement aux sources conventionnelles, les biocarburants peuvent être considérés aujourd'hui comme la seule alternative renouvelable pour le secteur du transport. Cependant, d'un point de vue technologique, une question se pose en ce qui concerne l'impact de ces carburants alternatifs sur la performance du moteur et la forme de distribution-stockage. Egalement, d'un point de vue sociétal, les biocarburants de première génération (principalement l'éthanol fabriqué à partir de maïs ou de canne à sucre, ou le bio-Diesel fabriqué à partir d'huile végétal) ont provoqué une grande controverse avec la forte hausse des prix alimentaires au début de 2011 contribuant à la faim et l'instabilité politique des pays en voie de développement. De plus, des préoccupations environnementales, telles que la pollution par les engrais, les pesticides et les herbicides, l'érosion des sols et l'exorbitante consommation d'eau nécessaire lors de sa production, sont apparues.

Face à ces problématiques, des chercheurs pensent que les biocarburants de deuxième génération, fabriqués à partir de déchets végétaux, ou à partir de cultures spécialement destinées à cet effet, sur des terrains non propices à la production alimentaire, offrent un grand espoir pour la production des biocarburants dans un futur proche. Ainsi, par exemple, les biocarburants à partir d'algues offrent de nombreux avantages malgré la jeunesse de sa technologie (Oilgae Report 2011) : les algues ont une rapide croissance, elles peuvent être cultivées dans des réservoirs d'eau salée et d'eau d'égout (en le nettoyant en même temps), elles peuvent être utilisées comme un moyen de capter le CO_2, etc.

Dans l'attente d'une production à grande échelle de carburants de deuxième génération, les instances gouvernementales de nombreux pays industrialisés dans le monde,

en accord avec les industries pétrolières ont instauré des directives ayant pour but de favoriser le caractère durable de la production de biocarburants de première génération. Par exemple, en Europe la production est encouragée sur des terres en jachères ou sur des terres qui bénéficient de l'aide aux cultures énergétiques[1]. De la même façon, en terme de mélange, la directive européenne sur la qualité des carburants (Ec2003 17.5.2003) autorise de façon législative l'incorporation d'éthanol jusqu'à 15 % dans l'essence et d'EMHV (esters méthyliques d'huiles végétales) jusqu'à 5 % dans le gazole, pour une vente banalisée à la pompe. Des taux plus élevés sont parfaitement compatibles avec les moteurs actuels, mais une information à la pompe est alors obligatoire.

Grace à une plus grande efficacité de combustion, le carburant Diesel est très populaire en Europe où la filière bio-Diesel a eu un développement majeur. Le biodiesel (EMHV) peut être mélangé avec du gazole dans différentes proportions. La nomenclature utilisée peut varier selon son pourcentage en volume de biocarburant dans le mélange. De cette façon, **B5, B10**, **B30** et **B50** correspondent aux nomenclatures où le nombre indique le pourcentage en volume du biocarburant dans le mélange. On utilise le terme **B100** dans le cas du bio-Diesel pur.

La structure chimique du bio-Diesel diffère sensiblement de celle du gazole en raison de la présence d'atomes d'oxygène dans la chaîne alkyle. Ainsi, plusieurs études ont signalé que la combustion d'un carburant bio-Diesel entraine une baisse des émissions de particules, d'hydrocarbures imbrûlés et de CO, CO_2, CH_4 ainsi qu'une légère augmentation des émissions d'oxydes d'azote (NOx) et de formaldéhyde (CH_2O) par rapport au gazole conventionnel. De la même façon, cette étude a montré que l'oxygène intermoléculaire présent dans le carburant type bio-Diesel induit une vitesse d'oxydation plus importante que pour le carburant type gazole. Par rapport au gazole, les études sur la chimie détaillée de la combustion des mélanges gazole/biodiesel sont moins nombreuses. Cela vient des difficultés à maintenir en phase gazeuse ces mélanges principalement composés de longues chaînes carbonées (de l'ordre de 16 à 20 atomes de carbone par chaîne).

Face à la complexité de la composition des carburants réels contenant du biocarburant, et au défi de la mise au point de modèles chimiques de combustion capables de simuler le comportement réel de vrais carburants, des mélanges contenant un nombre limité de composants peuvent reproduire efficacement leur comportement. Une meilleure compréhension de la combustion des hydrocarbures les plus représentatifs des carburants « réels » ou commerciaux permettra d'améliorer l'efficacité et la performance des systèmes de combustion actuellement en exploitation, ainsi que de satisfaire les normes européennes d'émissions polluantes. Les mécanismes cinétiques détaillés peuvent être utilisés pour prédire et analyser la formation d'une vaste gamme de produits et contrôler les processus physico-chimiques tels que la vitesse de flamme et le délai d'auto-inflammation.

Un mécanisme chimique détaillé est un système composé d'un nombre plus ou moins important de réactions chimiques élémentaires, chacune caractérisée de ses constantes de vitesse directe et inverse déterminées soit par des expériences cinétiques fondamentales, soit par des traitements théoriques ou simplement, par analogie avec des réactions similaires. Pour qu'un mécanisme détaillé soit capable de simuler avec précision différents systèmes, il doit être développé et validé pour tout un ensemble de conditions expérimentales. Par conséquent, l'étendue du domaine de validation sur une base expérimentale limite

[1] http://www.ecolorama.fr/developpement-durable/4/natura-sciences/65/generalites-sur-le-diester/1986/

l'applicabilité de ce mécanisme. L'extrapolation des mécanismes détaillés d'un système à un autre est difficile et souvent imprécise.

Cette étude a pour but de fournir plus d'informations expérimentales sur les caractéristiques de la cinétique d'oxydation des carburants de type gazole et bio-Diesel réels, et de la comparer avec les résultats d'oxydation de carburants modèles constitués de trois familles d'hydrocarbures : les paraffines représentées par le *n*-décane, les polyaromatiques représentés par le 1-méthylnaphtalène et les oxygénés représentés par l'octanoate de méthyle. Ces expériences ont été réalisées dans un réacteur auto-agité (JSR), un tube à choc et une bombe sphérique ayant comme objectifs de : (1) vérifier l'accord entre la cinétique d'oxydation des carburants modèles et des carburants réels correspondant, (2) fournir de nouvelles informations sur la cinétique d'oxydation des carburants gazole/bio-Diesel sur une large gamme de conditions, (3) proposer et valider un schéma cinétique robuste capable de prédire l'oxydation des carburants gazole, bio-Diesel ainsi que des composants primaires des carburants modèles, dans un vaste domaine de pressions, de températures et de richesses.

Chapitre 1.

Les biocarburants

1.1 Contexte actuel

Les *biocarburants* sont des carburants fabriqués à partir de matériaux renouvelables. Ils peuvent être divisés en trois catégories : (1) les *biocarburants de première génération,* principalement fabriqués à partir d'huiles végétales, de sucres et amidons comestibles, (2) les *biocarburants de deuxième génération,* fabriqués à partir de matières végétales non comestibles, et enfin, (3) *les biocarburants de troisième génération,* fabriqués à partir d'algues et d'autres micro-organismes.

Au cours des vingt dernières années, les biocarburants ont gagné une place importante dans les principales sources d'énergie primaire, après le pétrole, le charbon, le gaz et le nucléaire. Ils offrent une alternative renouvelable aux hydrocarbures pour le secteur du transport et, comme on verra au cours de cette étude, leur utilisation en mélange avec les carburants traditionnels permet d'envisager une diminution des émissions de certains polluants pour les véhicules.

Suite à la crise pétrolière des années 70 les efforts internationaux se sont orientés vers la production de biocarburants, principalement l'éthanol et le bio-Diesel, afin de réduire la dépendance aux carburants fossiles et de promouvoir un respect de l'environnement en réduisant les rejets de dioxyde de carbone fossile et d'autres polluants. Dans un contexte marqué par la volonté de diversifier les sources d'énergie, de réduire la consommation du pétrole et les rejets de gaz à effet serre, ils devraient jouer un rôle majeur dans le bouquet énergétique de demain.

Ces sources d'énergie renouvelables font l'objectif de nombreuses initiatives politiques de plusieurs pays et des investissements du secteur industriel. Ainsi, les zones mondiales les plus impliquées dans leur développement sont notamment les Etats-Unis, le Brésil, l'UE et des pays asiatiques[2].

L'épuisement des sources fossiles et la hausse du prix du baril de pétrole ont généré encore plus d'intérêt envers les carburants alternatifs. Les efforts visant à réduire la dépendance pétrolière et les émissions ont également conduit les constructeurs automobiles à développer d'autres technologies alternatives qui ne

[2] http://www.biofuels-platform.ch/infos/eu-biodiesel.php

reposent plus seulement sur les combustibles fossiles ou les biocarburants (la voiture électrique, la pile à combustible…).

Dans cette perspective, on peut envisager un parc automobile du « futur » reposant sur différents approvisionnements énergétiques, telles que la pile à combustible, le moteur à hydrogène, le moteur électrique ou des compromis technologiques, e.g. hybride électrique / carburant ou biocarburant, entre autres. Plusieurs de ces technologies ont vu le jour suite à la croissance du prix du carburant. Quelques autres ne se sont pas encore montrées économiquement viables du fait du prix de leurs matériaux de conception, leurs réseaux d'approvisionnement ou, tout simplement, à cause des problèmes de stockage.

La disponibilité des alternatives énergétiques aux hydrocarbures pour le transport est toutefois limitée par les surfaces cultivables nécessaires et les risques de compétition avec les usages alimentaires. Pour cette raison, l'avenir des biocarburants passera sans doute par la mise au point de nouvelles filières basées sur la valorisation de la matière ligno-cellulosique (bois, paille) et d'algues.

Aujourd'hui les mélanges biocarburant/carburant fossile offrent des solutions particulièrement attractives par rapport aux autres carburants alternatifs (GNV, GPL). Car, du point de vue des constructeurs, une adaptation particulière du véhicule n'est pas nécessaire (pour des taux d'incorporation entre 5 et 10%, comme c'est le cas en Europe) ; et du point de vue des groupes pétroliers, son usage ne nécessite pas non plus le développement d'un système de distribution dédié. Ainsi, ils peuvent bénéficier des réseaux actuels de distribution de carburants.

1.2 Les principales filières d'aujourd'hui

Il existe deux types de biocarburants qui sont principalement produits dans le monde : l'éthanol et les esters méthyliques d'huiles végétales (EMHV). Le premier, est majoritairement utilisé en mélanges avec des carburants de type « essences », et le deuxième est destiné à une utilisation dans des moteurs à allumage par compression du type « Diesel ».

1.2.1 Filière bioéthanol

Le bioéthanol est l'éthanol obtenu à partir de matière première végétales. C'est aujourd'hui le biocarburant dont l'usage est le plus répandu dans le monde. Les principaux producteurs sont le Brésil et les Etats-Unis où son utilisation en mélange est obligatoire. Par exemple, au Brésil, depuis le 28 octobre 1993[3], le mélange obligatoire est fixé entre 20 et 25 % v/v (ou E20 à E25) d'éthanol dans l'essence, tandis que dans quelques Etats des Etats-Unis il est fixé à 10%v/v (ou E10) depuis

[3] http://legislacao.planalto.gov.br/legisla/legislacao.nsf/Viw_Identificacao/lei%208.723-1993?OpenDocument

2008[4]. En France, la réglementation fixe son utilisation à 10% v/v depuis 2010. Toutefois la commercialisation de carburant contenant 85% de bioéthanol et 15% d'essence sans plomb a été autorisée depuis le 2007.

Le bioéthanol peut être produit de trois façons différentes à partir de la biomasse :

- Par fermentation.
- Par gazéification suivi d'un procédé de synthèse.
- Par hydrolyse suivi d'un procédé de fermentation.

Toutes les formes de biomasse, telles que les plantes sucrières (comme la canne à sucre ou la betterave) et les plantes amylacées (comme le blé ou le maïs), peuvent être utilisées pour la production de bioéthanol par fermentation suivi d'une étape plus ou moins intense de distillation qui sépare l'alcool de l'eau (Figure 1).

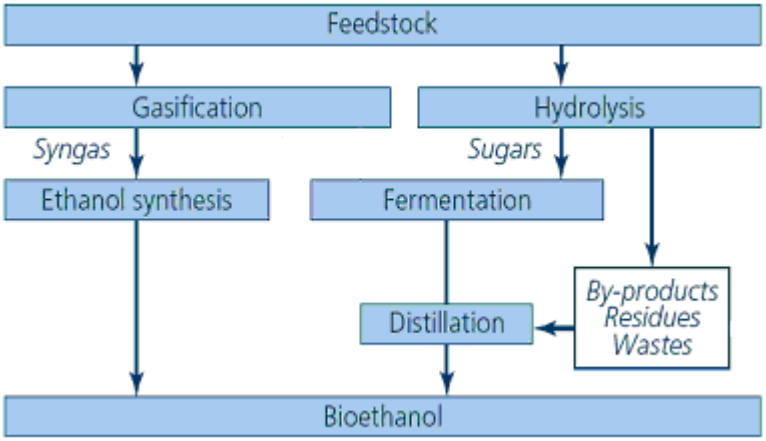


Figure 1. Schéma thermique et biologique pour la production de bioéthanol. *The Royal Society 2008*.

L'usage du bioéthanol pur ou à très forte concentration (par exemple l'E85 soit 85%v/v dans l'essence) nécessite une adaptation spécifique du véhicule (systèmes d'injection, réglages moteur, compatibilité des plastiques et des joints, stratégies spécifiques pour le démarrage à froid pour le bioéthanol pur) d'après The Royal Society 2008. Quand la pression de vapeur du mélange se trouve en dessous de 45 kPa, l'allumage par temps très froid ne peut pas être garanti, ceci limite le pourcentage maximum de bioéthanol incorporé à l'essence pendant les mois d'hiver à l'E75 (Figure 2). Des constructeurs comme GM, Ford, PSA et Renault, ont déjà mis sur le marché des véhicules pouvant fonctionner indépendamment à l'E85 ou l'E100 dans des pays comme le Brésil ou les États-Unis.

[4] http://www.ethanol.org/index.php?id=79&parentid=26

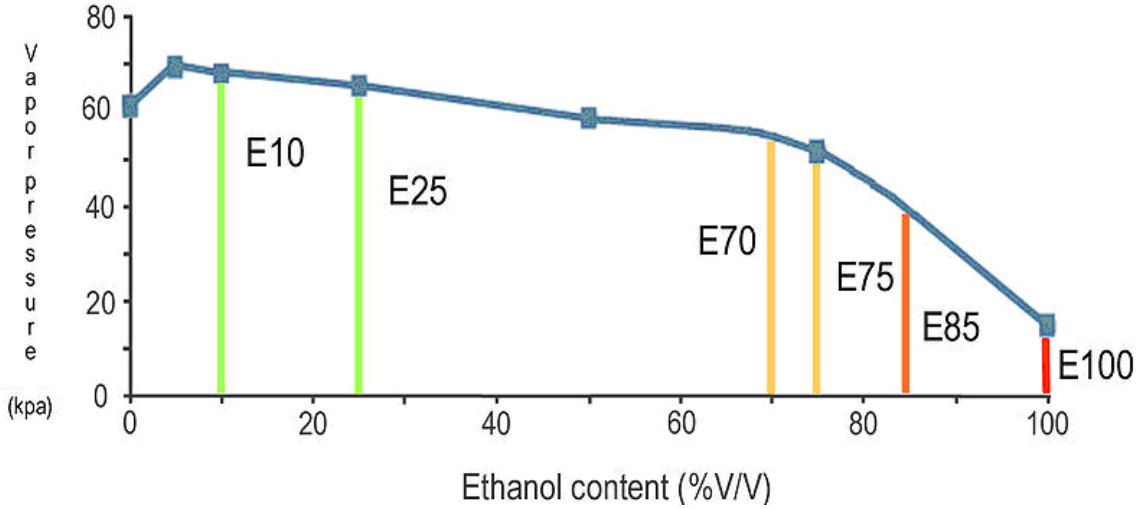


Figure 2. Relation entre le taux de bioéthanol et la pression de vapeur pour des mélanges essence/bioéthanol (*Source : basé sur les données fournies par J. Bennett, Ford Motor Company 2007*).

1.2.2 Filière bio-Diesel (EMHV - ester méthylique d'huile végétale)

Parmi les matières premières traditionnelles des EMHV, on trouve les huiles de colza, de tournesol, de soja, de palme et quelques huiles d'origine animale. Les huiles végétales sont inadaptées à une utilisation directe dans les moteurs à allumage par compression du type Diesel à cause de leur viscosité[5] élevée, de leur indice de cétane[6] trop faible et de leur faible volatilité.

Afin d'obtenir des caractéristiques similaires à celles du gazole d'origine fossile, les huiles végétales sont transformées en présence de méthanol, grâce à une opération de transestérification, en esters méthyliques d'huiles végétales et en glycérine (0,1 t de glycérine/t d'EMHV, Figure 3 et Figure 4). Cette réaction est obtenue à l'aide d'un catalyseur (hydroxyde de sodium, de potassium ou méthoxyde de sodium CH_3ONa), à température modérée (20-80°C) et à pression atmosphérique. Les petites molécules de bio-Diesel ainsi obtenues peuvent alors être utilisées comme carburant dans les moteurs à allumage par compression (moteur Diesel).

[5] Une viscosité trop faible peut entraîner le grippage de la pompe d'injection. A l'inverse, si celle-ci est trop grande, elle engendre des pertes de charge dans la pompe et les injecteurs. Dans ces conditions, la pression d'injection chute et la pulvérisation est moins homogène dans la chambre de combustion.

[6] Evalue la capacité d'un carburant à s'enflammer sur une échelle de 0 à 100. Cette qualité est mesurée par l'indice de cétane. Cet indice est mesuré en comparant les prédispositions à l'auto-inflammation du carburant à celles d'un mélange binaire composé de deux molécules référence : le cétane (ou *n*-hexadécane) très sensible à l'auto-inflammation (indice de cétane égal à 100) et le 1-méthylnaphthalène, très résistant à l'auto-inflammation (indice de cétane égal à 0). Un carburant d'indice de cétane X se comportera donc comme un mélange constitué de X % de cétane et (100 - X) % de α -methylnaphthalène. On utilise aussi l'isocétane (2,2,4,4,6,8,8-heptaméthyle nonane), dont l'indice de cétane est de 15, à la place du 1-méthylnaphthalène.

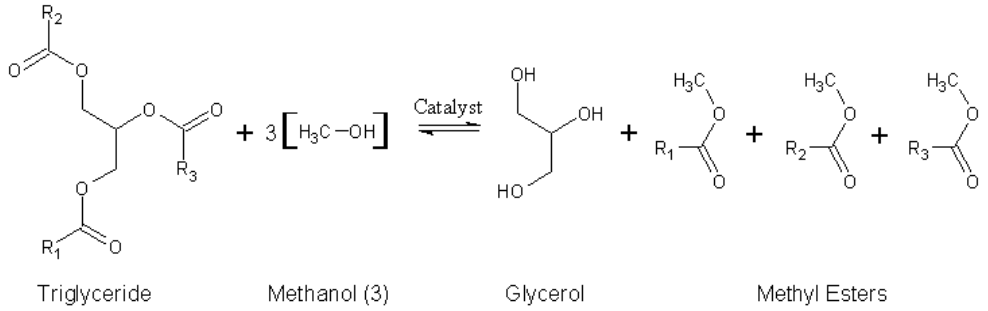


Figure 3. Transestérification d'un triglycéride par le méthanol (CH_3OH).

Les esters produits par cette réaction ont une viscosité plus faible que les huiles correspondantes (Tableau 1). En fonction de la composition chimique de chaque huile végétale, les propriétés finales du bio-Diesel seront aussi légèrement différentes. C'est pourquoi les mélanges de plusieurs huiles peuvent être nécessaires pour atteindre des propriétés optimales pour ce carburant.

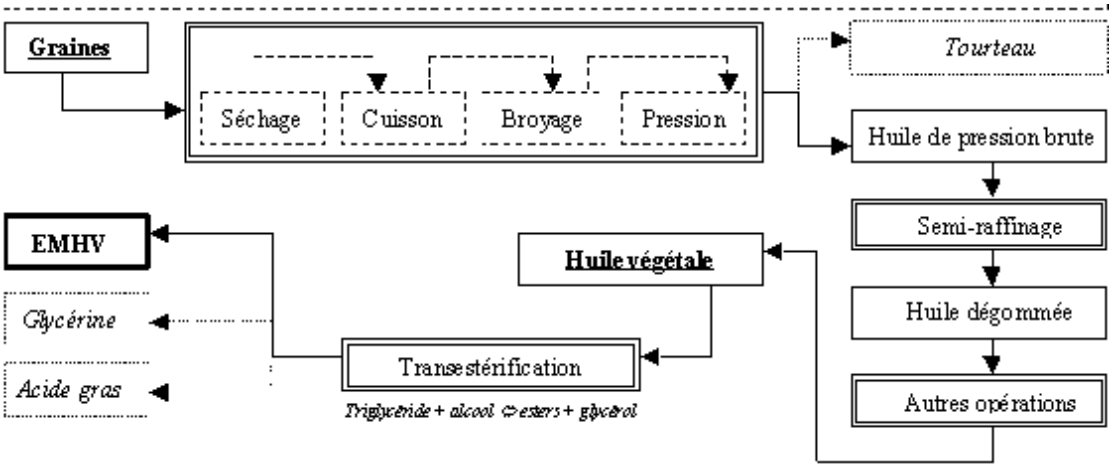


Figure 4. Procédé de fabrication d'EMHV. (Source *: DGEMP*)

La vitesse de la réaction chimique peut être améliorée par ultrasonification, ou par cavitation hydrodynamique, ou par radiation par micro-ondes (Basha *et al.* 2009), augmentant ainsi le rendement de la transestérification des huiles végétales et des graisses animales en bio-Diesel.

En 2010, les pays ayant la plus importante production d'EMHV dans le monde étaient les États-Unis, l'Allemagne et la France, même si de nombreux autres pays s'intéressent au gazole d'origine végétale. Tout comme l'éthanol, l'EMHV utilisé pur nécessite des adaptations spéciales du véhicule. Aujourd'hui, l'EMHV est principalement utilisé en mélange à des teneurs variant entre 5 et 30%v/v.

Tableau 1 Caractéristiques comparées du gazole et des esters méthyliques de colza. ***(Source : IFP)***

Caractéristiques	Gazole	Esters méthyliques de colza
Densité à 15°C (kg/l)	0,840	0,883
PCI volumiques (kJ/l)	35952	33024
Viscocité à 20°C (cst)	3,80 à 8,52	7,5
Viscosité à 40°C (cst)	2 à 4,5	4,46
Température limite de filtrabilité (°C)	-2 à -15	-12
Indice de cétane	48	48,7

Le bio-Diesel présente aussi des avantages en matière d'incorporation, de stockage et de transport. L'EMHV peut être incorporé aussi bien en raffinerie qu'en dépôt dans n'importe quel gazole, il se mélange sans difficulté et peut être stocké et distribué par tout mode de transport, dont les oléoducs.

En Europe, et tout particulièrement en France, la part des véhicules Diesel dans le parc automobile est aujourd'hui plus importante que celle des véhicules à essence. Le bio-Diesel qui se substitue au gazole permet donc de réduire les importations de gazole et d'améliorer la balance commerciale de la France, tout en réduisant les rejets de CO_2 fossile dans l'atmosphère. La stratégie de réduction de la dépendance énergétique de la France, vis-à-vis du pétrole, se justifie d'autant plus depuis les hausses des cours du pétrole en 2008.

A plus long terme, la production de bio-Diesel peut passer par les biotechnologies (par exemple des modifications génétiques) pour la production directe d'esters éthyliques d'acides gras à partir de ligno-cellulose par des organismes tels que les Actinomycètes et aussi par la production d'esters lourds dans les plantes (Kalscheuer *et al.* 2006).

1.3 Le cadre législatif européen

1. 3.1 Réduction des émissions CO_2 des véhicules légers

L'explosion du parc automobile mondial (Figure 5), ainsi que des distances parcourues, renforcent les risques d'une dépendance accrue du transport vis-à-vis du pétrole. Le transport routier, entrainé par la demande de pays en développement, va poursuivre sa forte croissance. Selon l'OCDE (Organisation de Coopération et de Développent Economiques), le parc de véhicules devrait, dans les vingt ans à venir, encore s'accroitre d'un tiers dans les pays industrialisés et tripler dans le reste du monde.

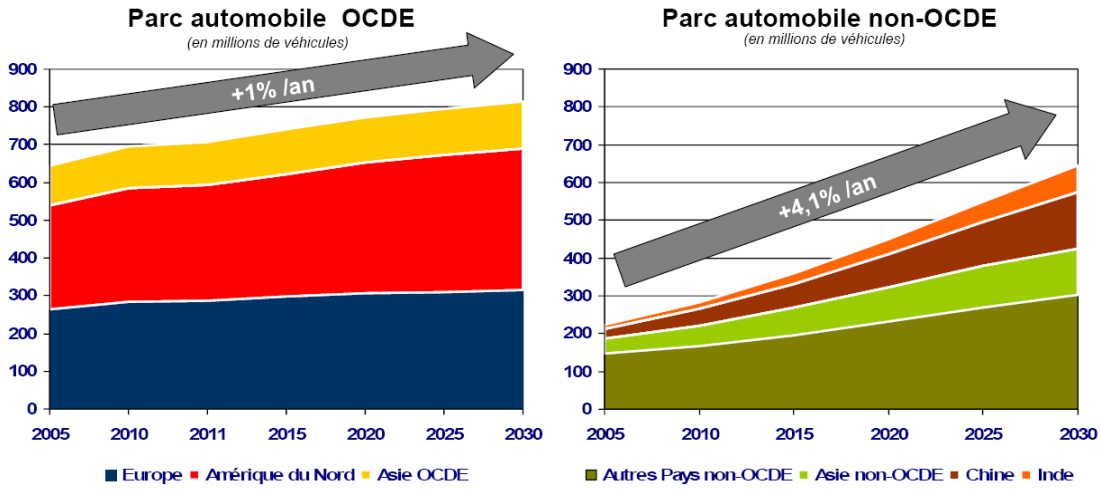


Figure 5. Evolution du parc automobile mondial. Une croissance tirée par les pays en voie de développement. (*Source : TOTAL*, Mosconi 2006)

Les constructeurs automobiles sont statistiquement responsables de 12 à 14% des émissions de CO_2. Bien qu'ils visent une diminution de leurs émissions (grâce à une meilleur consommation et à un respect des réglementations), ils devraient augmenter leur production dans les vingt prochaines années de plus d'un tiers dans les pays industrialisés, et de plus de trois fois dans le reste du monde. Ainsi, cette augmentation de leur production intensifiera les rejets de CO_2 (Figure 6) liés au transport, qui devraient pratiquement doubler dans les vingt ans à venir. Dans les pays industrialisés, le transport serait ainsi en 2030 responsable d'un tiers du total des émissions de CO_2 (total mondial estimé ≈ 38,2 milliards de tonnes en 2030, Mosconi 2006).

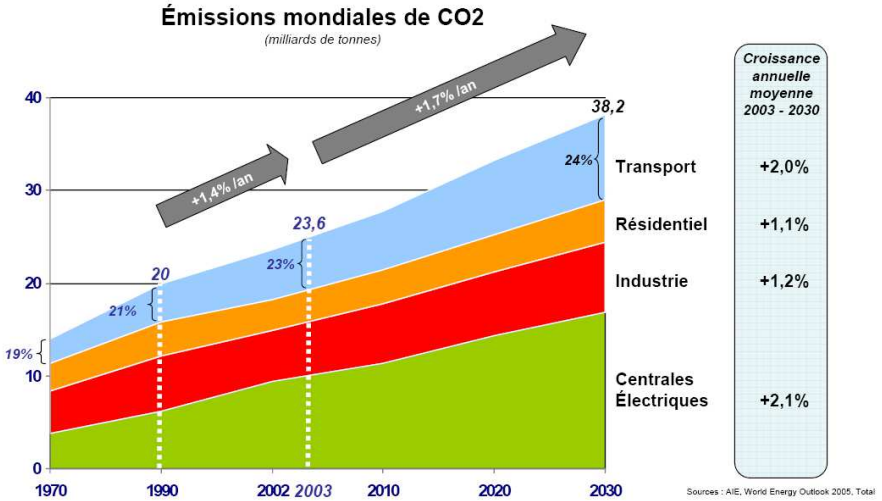


Figure 6. Evolution des émissions mondiales de CO_2 et prévisions à l'horizon 2030. Mosconi 2006

Pour les années à venir, l'EU a établi des stratégies (COM 07.02.07) en matière d'émissions de CO_2 des véhicules utilitaires légers : « Les véhicules neufs devraient réduire en moyenne leurs émissions de CO_2 à 140 g CO_2/km (2008- 2009) et à 120 g CO_2/km (d'ici à 2015) ».

1.3.2 Les normes antipollution

Les normes EURO réglementent les émissions de quatre principaux polluants : le monoxyde de carbone (CO), les hydrocarbures imbrûlés (HC), les oxydes d'azote (NOx) et les particules de suie (PM : Particulate Matter). Il s'agit d'un ensemble de normes de plus en plus strictes s'appliquant aux véhicules neufs. Le Tableau 2 récapitule les restrictions des normes EURO I à EURO VI mises en application à partir de 1993. Comme le montre ce tableau, les limites de polluants admissibles à l'échappement des véhicules neufs ont été drastiquement réduites entre 1993 et 2015 (≈ 65 % pour les NOx, ≈ 95 % pour les particules de suies notamment).

Tableau 2. Récapitulatif des normes européennes EURO I à EURO VI limitant les émissions de polluants à l'échappement des véhicules Diesel neufs[7]. Emission en g.km^{-1}

Norme	Mise en application	CO	NOx	HC+NOx	Particules
Euro I	**1993**	2,72	-	0,97	0,140
Euro II	**1996**	1,00	-	0,90	0,100
Euro III	**2001**	0,64	0,50	0,56	0,050
Euro IV	**2005**	0,50	0,25	0,30	0,025
Euro V	**2009**	0,50	0,18	0,23	0,005
Euro VI	**2014**	≤0,50	0,08	*0,17 ?*	*En discussion*

Pendant les vingt dernières années, les constructeurs et pétroliers ont envisagé plusieurs solutions pour le respect des normes. Ainsi, les procédés de post-traitement des gaz d'échappement, l'optimisation du contrôle moteur, les carburants alternatifs et la reformulation des carburants font partie des moyens nécessaires pour atteindre ces exigences.

1.3.3 L'incorporation des biocarburants dans les carburants fossiles

La Directive Européenne 2003/30/EC visant à promouvoir l'utilisation de biocarburants ou autres carburants renouvelables dans les transports, autorise réglementairement l'incorporation d'éthanol jusqu'à 15 % dans l'essence et d'EMHV jusqu'à 5 % dans le gazole, pour une vente banalisée à la pompe. Des taux plus élevés sont parfaitement compatibles avec les moteurs actuels, mais une information à la pompe est alors obligatoire.

De nombreux pays mettent aujourd'hui en place des réglementations ou des incitations pour favoriser l'usage des biocarburants. Les pays européens ont ainsi pour objectif de faire passer la part des biocarburants à 5,75 % de leur consommation totale de carburants, exprimé en PCI, en 2010 (directive 2003/30/CE) et à 10 % en 2020.

[7] Les valeurs pour la norme EURO VI sont données à titre d'information mais sont toujours en discussion. La date est fixée à partir du 1er janvier 2014.

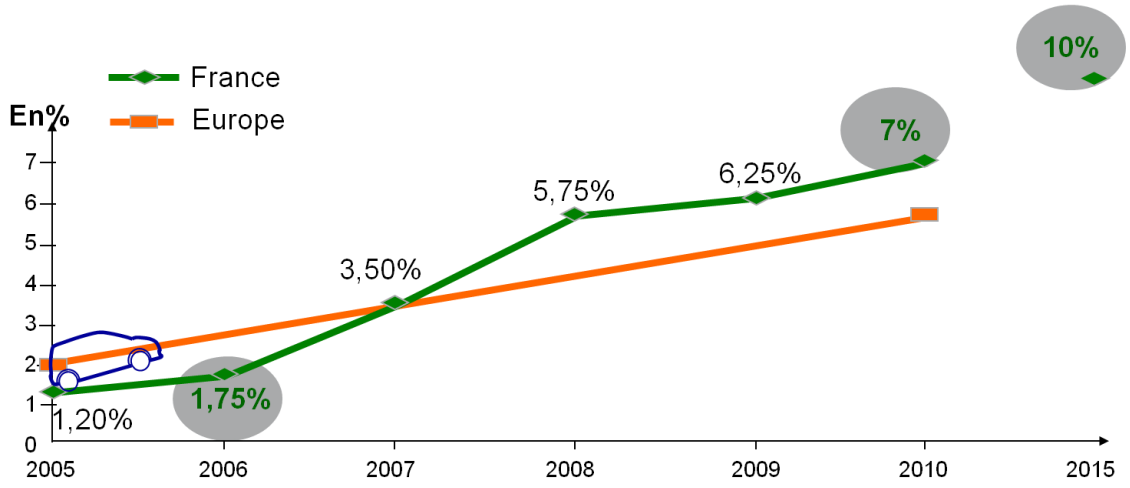


Figure 7. Taux d'incorporation de biocarburants. Cadre législatif : cas de la France (Bénézit 2007).

En France, à partir de 2004 le gouvernement s'est fixé comme objectif ambitieux le développement des biocarburants à l'horizon de l'épuisement de carburant minéral. Le taux d'incorporation des biocarburants dans l'essence et dans le gazole devrait atteindre 5,75% exprimé en valeur énergétique. Au cours de la même année ce taux n'atteignait en France que 0,8%, soit 7 fois moins (Prévot *et al.* 2005). Mais à partir de 2007, la France atteint les objectifs européens et à partir de 2008 s'est fixé ses propres objectifs qui dépassent largement ceux de l'UE (Figure 7). En 2009, la France a atteint son objectif d'incorporation de 6,25% avec une consommation de biocarburant de 2 511 490 tep (tonne d'équivalent pétrole), soit une augmentation de 10,4 % par rapport à 2008 (EurObserv'ER 2010).

La directive sur la promotion des biocarburants fixe des objectifs indicatifs de croissance de la consommation de biocarburants dans le domaine des transports accompagnés d'une exonération partielle de la Taxe Intérieure sur les Produits Pétroliers, (TIPP) sur les volumes sous agrément, qui a pour but de donner la possibilité aux États membres d'exonérer partiellement ou totalement les biocarburants. Le contexte fiscal des carburants reste du domaine de chaque pays. Par exemple, en France pour l'année 2008 les montants de défiscalisation ont été réduits (Projet de loi de finances pour 2009, SENAT):

1) de **25 (en 2007) à 22 euros** par hectolitre pour les biocarburants incorporés au gazole (EMHV, esters méthyliques d'huile animale et bio-Diesel de synthèse) ; soit 220 euros par mètre cube.

2) de **33 (en 2007) à 27 euros** par hectolitre pour l'éthanol incorporé au supercarburant.

Egalement il a été signifié l'utilisation possible de l'EMHV à des taux plus élevés : une teneur maximale autorisée en France de 30% dans des flottes captives de transport, ou pur, comme autorisé en Allemagne avec des précautions particulières.

Pour mieux comprendre l'impact que ces biocarburants pourraient avoir sur la consommation, il suffit de comparer le PCI (Pouvoir Calorifique Inferieur) des biocarburants, à volume identique, à celui des carburants auxquels ils se substituent. Ainsi, le rapport est de 0,92 pour les EMHV par rapport au gazole et de 0,66 pour l'éthanol par rapport à l'essence. En d'autres termes, il faut 1,063 litres d'EMHV pour produire la même énergie qu'un litre de gazole et 1,5 litres de bioéthanol pour produire la même énergie qu'un litre d'essence Prévot *et al.* 2005.

1.4 L'offre et la demande

La production des biocarburants dans le monde, qui a atteint un total de 52 Mtep en 2009, augmente actuellement de manière importante. Elle reste essentiellement portée par trois grandes régions : les États-Unis (22Mtep), le Brésil (13Mtep) et l'Europe (10 Mtep), même si de nombreux autres pays s'intéressent à ces carburants d'origine végétale (ENERS 2009).

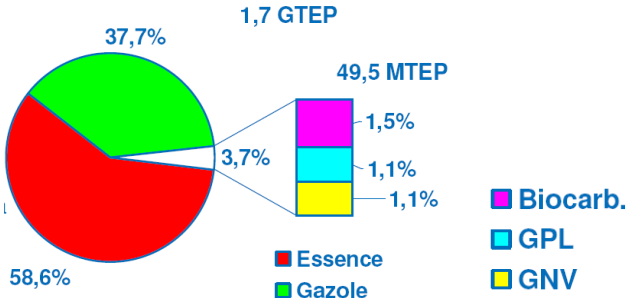


Figure 8. Consommation mondiale d'énergie dans le transport routier en 2006. (Source : *IFP*)

Selon des estimations faites par le groupe TOTAL, la biomasse (hors biocarburants) pourrait couvrir plus de 11% des besoins mondiaux en énergie primaire à l'horizon 2030. Cependant, cette production reste encore très modeste par rapport à la production de carburants pétroliers (de l'ordre de 1,5 % en 2006, Figure 8).

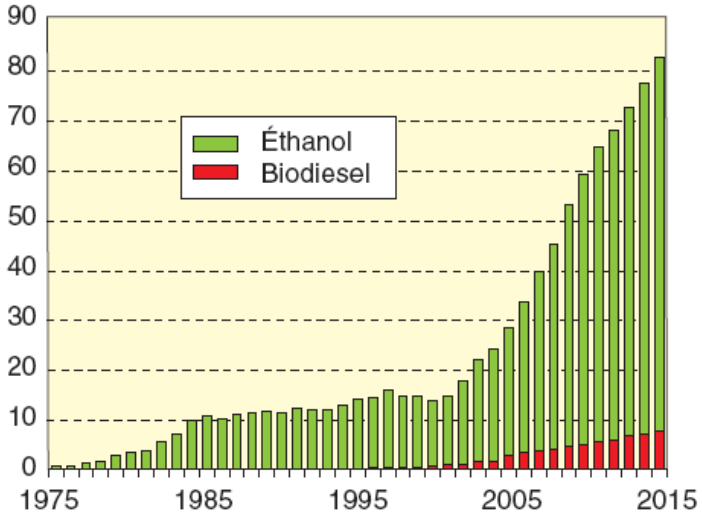


Figure 9. Production mondiale de biocarburant (en Mt). (Source : F.O. Licht, Christoph Berg, présentation au World Biofuels 2006, Seville).

Sur les cinq dernières années, la croissance mondiale de la production de biocarburants a été de l'ordre de 15 % par an. La hausse s'est même accélérée très récemment puisque la production de bio-Diesel a crû de plus de 60 % entre 2004 et 2007 (Prieur-Vernat *et al.* 2007).

La consommation d'EMHV, qui reste encore une spécificité européenne, étant environ 10 fois inférieure à la production d'éthanol, a augmenté de manière très importante ces dix dernières années. Le taux de croissance moyen annuel a été de 35% entre 1992 et 2002, soit une multiplication par 20 de la production d'EMHV sur cette période (Figure 9). Deux pays ont fortement contribué à cette croissance : la France et l'Allemagne. Ainsi, la production mondiale d'éthanol carburant en 2009 s'élevait à 73954 Ml (4% pour l'Europe et 88% pour les Etats-Unis et le Brésil) alors que, la même année, la production de bio-Diesel atteignait près de 17929 Ml (49% pour l'Europe et 20% pour les Etats-Unis et le Brésil).

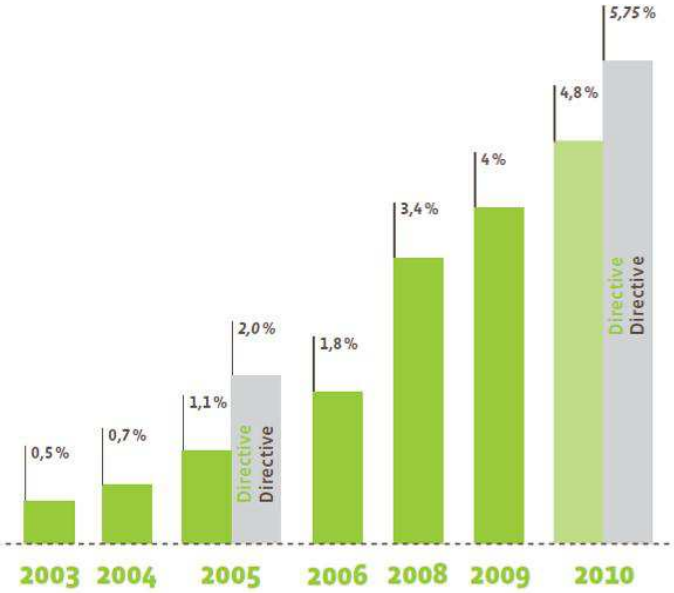
Ce comportement est lié en grande partie à l'augmentation de la consommation de gazole dans l'UE motivée par la grande efficacité des moteurs à allumage par compression, accompagnée d'une densité d'énergie volumique du carburant gazole légèrement supérieure à celle de l'essence. Aux Etats-Unis, où les carburants sont nettement moins chers, il n'y a pas eu la même pression pour gagner en efficacité énergétique et l'essence est restée le carburant dominant dans le secteur des transports.

Le graphique de la Figure 10 décrit l'évolution de la consommation européenne (UE-27) de bio-Diesel et de bioéthanol entre 1992 et 2006.

Pays/ Country	Bioéthanol/ Bioethanol	Biodiesel/ Biodiesel	Autres**/ Others**	Consommation totale/ Total consumption
Germany	746 776	2 281 791	53 908	3 082 475
France	490 112	2 138 627	-	2 628 739
Spain	233 179	1 192 627	-	1 425 807
Italy	139 940	1 254 013	-	1 393 953
United Kingdom	316 495	823 660	-	1 140 155
Poland	187 184	710 713	3 180	901 078
Austria	63 457	354 858	119 175	537 489
Sweden	203 943	198 340	49 355	451 638
Belgium	52 119	305 917	-	358 036
Netherlands	134 136	94 559	-	228 695
Slovakia	45 142	132 560	-	177 701
Hungary	57 615	117 009	-	174 625
Finland	73 517	62 745	58	136 320
Greece	0	124 810	-	124 810
Ireland	27 324	79 249	2 036	108 610
Lithuania	10 412	34 731	-	45 144
Slovenia	2 904	41 724	-	44 628
Total EU 27	**2 933 977**	**10 741 771**	**227 712**	**13 903 460**

* Estimation. ** Huiles végétales utilisées pures pour l'Allemagne, l'Autriche, l'Irlande, biogaz carburant pour la Suède et la Finlande. Pure vegetable oils used for Germany, Austria, Ireland, biogas fuel for Sweden and Finland.
Source: EurObserv'ER 2011.

(a)



(b)

Figure 10. (a) Consommation de biocarburants destinés au transport dans l'Union européenne en 2010, (b) Comparaison de l'évolution de la consommation européenne de biocarburant (en tep) entre 2003 et 2010 avec les objectifs de la directive sur les biocarburants (2003/30/EC − Source EurObserv'ER 2010).

Si la consommation de bioéthanol a fortement progressé au cours des dix dernières années en Europe, son rythme de croissance a été sensiblement moins élevé

que celui de la filière bio-Diesel. En termes d'énergie, la consommation de bio-Diesel était plus de 4,1 fois supérieure à celle de bioéthanol en 2009 (Figure 10). Depuis l'introduction de la directive 2003/30, la croissance de la consommation de biocarburants s'élevait à 70,9% en 2005-2006, à 46,7% en 2006-2007, à 31,4% en 2007-2008 et seulement à 18,7% en 2008-2009 ; une croissance qui présente une tendance à la baisse au fil du temps (EurObserv'ER 2010). Par rapport à la consommation d'essence et de gazole conventionnels, les biocarburants représentaient seulement 4,8% en 2010, ce qui était encore loin de l'objectif fixé de 5,75% en 2010. Ainsi, consciente de la difficulté à atteindre l'objectif de 2010, l'UE a adopté la directive Ec2009 28.4.2009, pour limiter l'incorporation à 10% d'ici 2020.

1.5 L'avenir des biocarburants

Comme mentionné précédemment, il existe principalement trois générations de biocarburants, les carburants de 1ère génération issus de sources alimentaire, les carburants de deuxième génération issus des déchets organiques, et les carburants de troisième génération issue d'algues et autres micro-organismes.

Le développement de la 1ere génération de biocarburants à grande échelle a déclenché beaucoup de polémiques à cause de la hausse des prix alimentaires, la consommation importante d'eau et la pollution des terres et sources d'eau liées à l'augmentation de la demande en carburant. Face à ces problèmes, de nombreux programmes de recherche dédiés aux nouvelles générations de biocarburants, à partir de matières premières non-alimentaires, commencent à donner leurs premiers résultats. Jusqu'à présent, ils n'ont pas été produits à grande échelle mais leur industrialisation commence à être envisageable du fait de leurs coûts compétitifs. Ces filières, appelées de 2ème génération pour les biocarburants issus de sources ligno-cellulosique (bois, feuilles, paille, etc.), et de 3ème génération issus des algues et microorganismes, suscitent un grand intérêt pour leur bon bilan énergétique.

1.5.1 Les biocarburants de 1ère génération

L'idée de transformer les fermes en usines à carburant semblait, à une époque, apporter une réponse à la demande croissante en énergie au risque de promouvoir une compétition entre les besoins alimentaires de la population et les besoins énergétiques pour le transport.

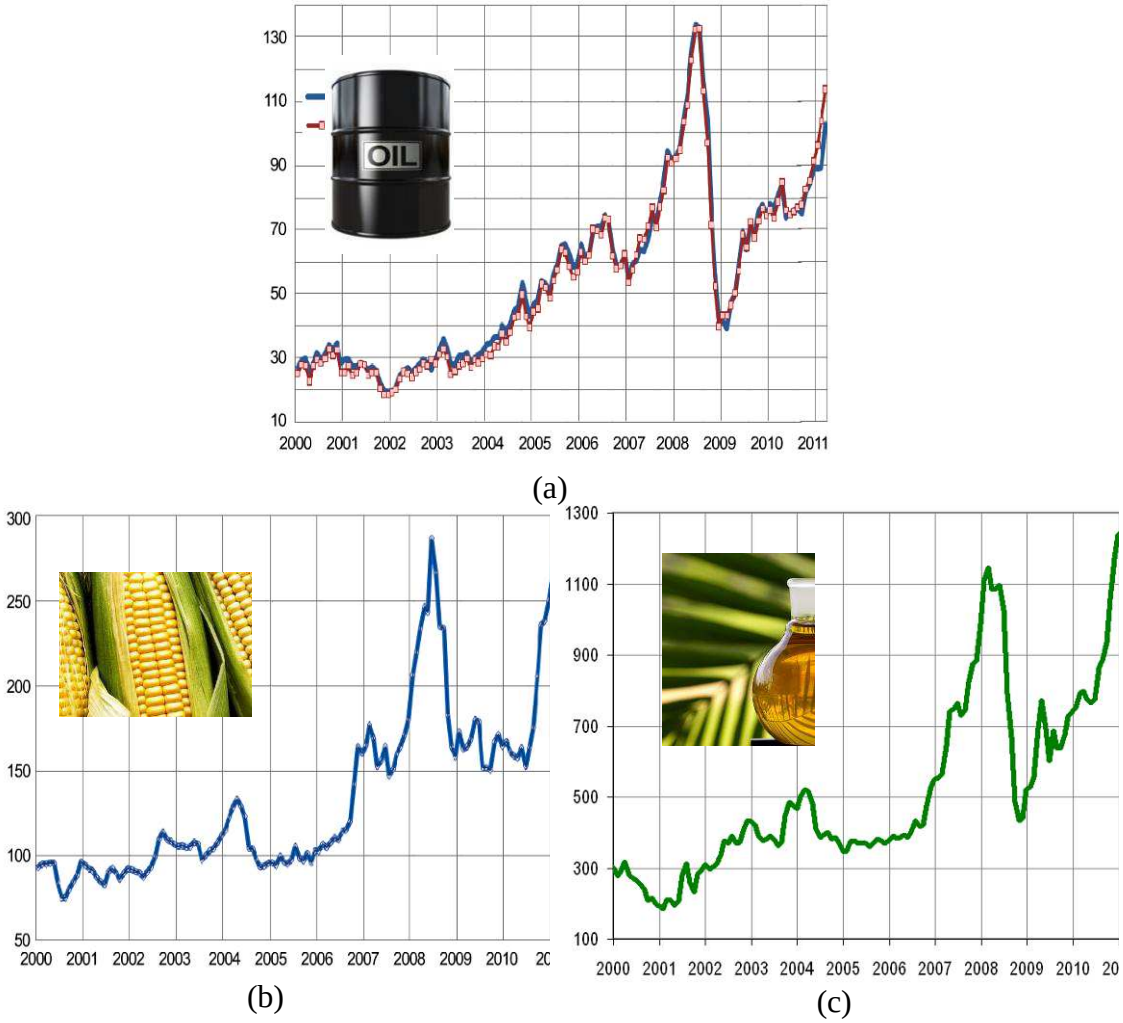


Figure 11. Evolution du prix en dollars (a) par baril de pétrole et (b) par tonne de maïs jaune (source *: Conseil Monétaire Centre-américain*) et (c) par tonne de huile de palme (source : index mundi).

La hausse de prix du baril de pétrole ces dernières années (Figure 11a) a fait augmenter la demande de maïs et d'huile de palme (Figure 11 b et c) pour la production de bioéthanol et de bio-Diesel dans le monde. L'Organisation des Nations Unies pour l'Alimentation et l'Agriculture ainsi que le Conseil Monétaire Centre-Américain ont observé une hausse des prix alimentaires mondiaux pendant huit mois consécutifs entre la fin 2010 et le début 2011. Pour les cas du maïs et de l'huile de palme, cette hausse a atteint le plus haut niveau de son histoire (Figure 11b et c). Comme on peut observer sur la Figure 11, les prix du maïs et de l'huile de palme, tout comme ceux des autres produits alimentaires destinés à la production de biocarburants ont suivi presque au même rythme les variations du prix du baril de pétrole. Cela est dû en partie à la demande constante des produits alimentaires et aux catastrophes naturelles qui ont affecté les récoltes, mais aussi en grande partie à cause de l'augmentation de la production de biocarburant de 1ère génération. Par exemple, l'impact de cette demande sur les prix du maïs est dû au fait qu'il ait un caractère fixe en termes de production d'éthanol. Dans un marché libre, si le prix du maïs augmente, la demande va baisser, modérant les prix du maïs. Mais la législation de certains pays

en termes de biocarburants exigent la même quantité de production d'éthanol quelque soit le prix de la matière première.

De plus, des études menée par des chercheurs de l'Université du Minnesota ont conclu que la quantité d'eau utilisée dans la production de bioéthanol varie énormément en fonction des conditions climatiques des cultures d'une zone à l'autre, allant de 5 à 2138 litres d'eau par litre d'éthanol produit selon les besoins d'irrigation régionale[8].

D'autres inconvénients liés à la production de carburants de première génération concernent l'énergie produite lors de sa combustion qui est inferieure (de 29% pour le bioéthanol) à celle nécessaire à sa production. De plus, l'engrais utilisé dans les cultures a grandement contribué à l'apparition de zones mortes et, enfin, certaines zones de l'océan possèdent une faible teneur en oxygène due à l'augmentation des produits chimiques dans l'eau.[9]

1.5.2 Les biocarburants de 2ème génération

Ces nouveaux biocarburants, qui devraient voir le jour à l'horizon 2020 (ou au-delà), seront obtenus par de nouveaux traitements de la biomasse, sur la base de ressources plus diversifiées : parties non alimentaires des plantes, graisses animales, paille, bois, déchets agro-alimentaires (Figure 12). Ainsi, on pourra obtenir de l'éthanol à partir de la cellulose extraite des plantes. Ils seront développés à partir de procédés durables adaptés en fonction de la zone géographique où ils seront mis en œuvre (territoire, climat) mais également en fonction des saisons.

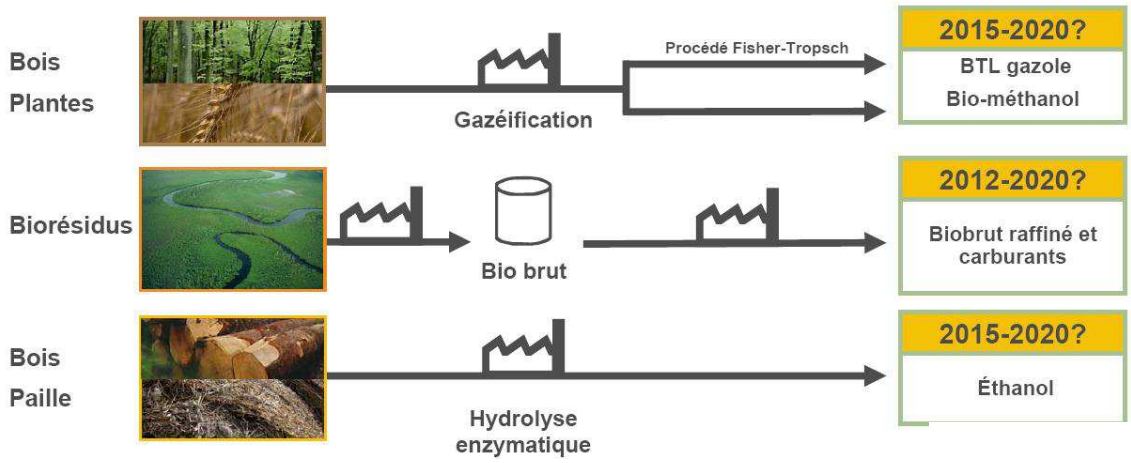


Figure 12. Biocarburants de deuxième génération. (*Source : TOTAL /ENERZINE*).

Dans les prochaines années, les technologies et les produits viseront :

[8] http://www.technologyreview.com/energy/22428/
[9] http://www.news.cornell.edu/stories/july05/ethanol.toocostly.ssl.html

- un prix compétitif grâce à une matière première diversifiée (co-produits agricoles, biomasse forestière, cultures dédiées, ...);
- la mise au point des procédés d'hydrolyse et de fermentation les mieux adaptés à chaque configuration des matières premières ;
- l'obtention des meilleurs bilans énergétiques et de gaz à effet de serre (GES) possibles sur l'ensemble de la chaîne de production ;
- une incorporation en plus fortes proportions sans risques pour le moteur, et sans modifications majeures des véhicules.
- un développement durable sur le long terme et tout au long de la filière « du champ à la roue ».

Les biocarburants ne remplaceront sans doute jamais complètement les produits pétroliers mais ils devraient néanmoins constituer une alternative non négligeable. Pour cette raison, Bruxelles a également approuvé la directive 2009/30 CE qui a introduit des critères de durabilité dans la production de biocarburants, ainsi ne seront acceptés que les biocarburants durables du « champ à la pompe ». Cela signifie que les biocarburants considérés dans les objectifs d'incorporation des états membres de l'EU devraient être en conformité avec la directive, en interdisant l'utilisation des biocarburants produits dans les forêts tropicales ou dans les zones déboisées après 2008, protégeant ainsi la biodiversité.

1.5.3 Les biocarburants de 3eme génération

Les biocarburants de troisième génération sont principalement produits par des micro-algues (Figure 13). On distingue deux façons de les cultiver, d'une part avec des procédés dit « intensifs » où les micro-algues croissent dans des photo-bioréacteurs fermés où l'on contrôle les paramètres physico-chimiques, et d'autre part les procédés dit « extensifs » dans des bassins en extérieur.

Les micro-algues peuvent subir différentes transformations pour être valorisées en biocarburants. Ainsi, elles peuvent être utilisées pour la production du bio-Diesel, du bioéthanol ou du biogaz[10] :

- Pour le cas du bio-Diesel, elles peuvent accumuler des acides gras jusqu'à 80 % de leur poids sec, permettant d'envisager des rendements supérieurs d'un facteur 30 aux espèces oléagineuses terrestres. Ces acides gras doivent être extraits puis trans-estérifiés pour produire du bio-Diesel.
- D'autres espèces de micro-algues peuvent contenir des sucres et ainsi être fermentées en bioéthanol.
- Enfin, les micro-algues peuvent être méthanisées pour produire du biogaz.

Parmi les avantages des micro-algues, on peut citer leur grande efficacité de captation de CO_2. Ainsi, une tonne d'algues a besoin de 1,8 tonne de CO_2 pour sa croissance. En combinant cette affinité pour le CO_2 avec le fait que les algues peuvent pousser presque n'importe où, beaucoup d'industries émettrices de CO_2 pourraient utiliser les algues pour absorber du CO_2 et générer du carburant. En effet, le CO_2 peut

[10] http://www.avenirdurable.org/Les-biocarburants-de-troisieme.html

être capté par exemple dans les fumées de centrales thermiques ou d'incinérateurs. Le rendement de production peut atteindre 20 à 40 TEP/ha/an (1 TEP équivaut à 41,868 GJ, soit 10 Gcal ou 11 630 kWh).

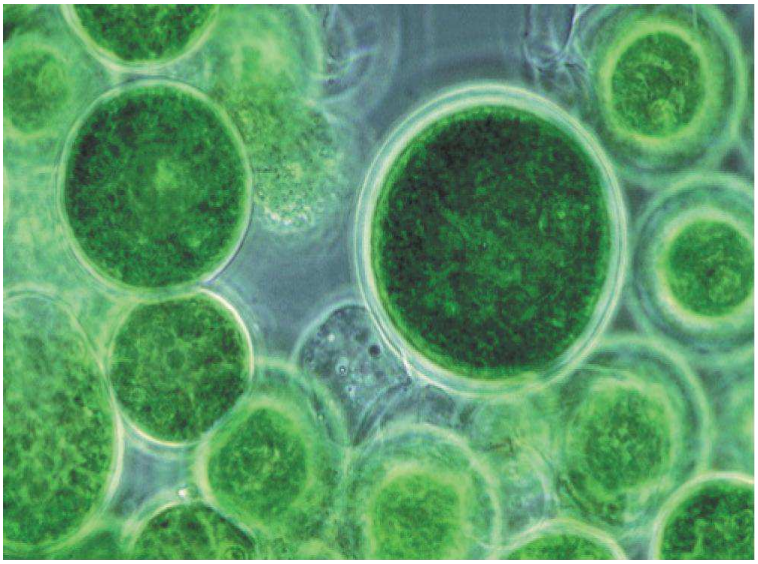


Figure 13. Vue microscopique de micro algues (source www.devicedaily.com)

En ce qui concerne la production de bio-Diesel, les études présentées dans l'Oilgae Report 2011 ont montré que la production de bio-Diesel à partir d'algues fournit la plus haute énergie nette, car l'énergie nécessaire à la conversion d'huile en bio-Diesel est beaucoup moins importante pour ce type de biocarburant par rapport aux autres procédés (tels que le méthane, éthanol, etc). Grace à cette caractéristique, le produit phare de cette nouvelle génération de carburant sera le bio-Diesel, à partir de souches à forte teneur en huile. En comparant sa production à d'autres cultures on pourrait dire en général que:

- Un hectare de soja produit entre 1 et 2,5 tonnes de biomasse par an.
- Un hectare de colza produit en moyenne 3 tonnes de biomasse par an.
- Un hectare de palme produit en moyenne 19 tonnes de biomasse par an.
- Et enfin, un hectare de micro-algues produit entre 14 et 255 tonnes de biomasse par an.

Figure 14. Algues cultivés dans des eaux usées (source : News Center Department of Energy)

De plus, dans certaines parties du monde, les algues sont déjà utilisées pour la biorestauration des eaux usées (Figure 14). La culture d'algues pour la production de biocarburants à partir d'eaux usées peut représenter un avantage supplémentaire de ce type de culture grâce à la grande disponibilité de nutriments dans ce milieu, ce qui amènerait dans un second temps à une baisse des coûts de production. Egalement, l'océan présente aussi des opportunités intéressantes pour l'algue-culture grâce à la disponibilité de grandes étendues de zones océaniques. Cette étude, certes très récente, met en relief des faibles coûts de production grâce à la disponibilité de nutriments fournis par les océans et les eaux usées.

Pour l'instant les inconvénients de cette nouvelle technologie sont à découvrir. La mise en œuvre industrielle de la production de biocarburant à partir de micro-algues reste à démontrer.

Perspectives

Les biocarburants jouent un rôle important dans le parc automobile d'aujourd'hui et de demain. Une bonne maitrise de leur comportement lors de leur combustion permettra de proposer une incorporation en plus forte proportion, sans risque pour le moteur et sans modification des véhicules.

Afin de trouver des solutions pratiques en matières de coût, de consommation d'eau, de concurrence avec l'alimentaire et de gestion de la production de biocarburants, de nombreux projets envisagent le développement de techniques de plus en plus performantes qui utilisent de nouvelles matières premières pour la production de biocarburants. Ainsi, l'utilisation de matières ligno-cellulosiques (bois, déchets de l'industrie d'huile ou canne à sucre, etc.), de biomasse et d'algues pourront être des solutions à moyen terme.

Chapitre 2.

Combustion du Gazole contenant du Bio-Diesel

D'importantes améliorations dans la performance du moteur seront encore nécessaires pour l'incorporation de biocarburants dans le transport routier, ayant pour objectif de rejoindre les normes européenne d'émission Euro −de plus en plus strictes− ainsi que de diminuer les émissions de CO_2 et la consommation de carburant. Les approches de conception du moteur les plus classiques s'appuient sur le développement de prototypes qui sont encore trop longues et très coûteuses pour répondre à ces défis. Ainsi, le développement des outils informatiques tels que des modèles de combustion qui intègrent une description de la chimie réactive, incorporant la mécanique des fluides, représenterait une grande avancée dans la capacité de concevoir un moteur ayant un rendement élevé et présentant de faibles émissions de polluants.

La chimie de la combustion des hydrocarbures est un processus complexe qui comporte un grand nombre d'étapes élémentaires. Les premières molécules d'hydrocarbures réagissent pour produire une multitude d'espèces intermédiaires qui subissent des transformations chimiques et, enfin, génèrent les produits finaux, c'est-à-dire le dioxyde de carbone (CO_2) et l'eau (H_2O), mais aussi des imbrûlés, des oxydes d'azote, etc.

$$\left(CH_yO_z\right)_\alpha + \frac{\alpha(4+y-2z)}{4}O_2 \longrightarrow \alpha CO_2 + \frac{\alpha y}{2}H_2O \quad (1)$$

Cette réaction globale (1) ne traduit que l'évolution globale des espèces, et donne approximativement les produits sans préciser les étapes intermédiaires de l'oxydation des hydrocarbures. Ces étapes comportent une diversité de molécules et de radicaux beaucoup plus grande.

En raison de la complexité de la composition des carburants réels gazoles et bio-Diesel, et avec l'objectif de mieux comprendre ces phénomènes chimiques de combustion et d'oxydation, des carburants modèles sont développés afin de permettre une meilleure compréhension au niveau moléculaire. Les carburants modèles sont la plus simple représentation des carburants réels. Ils sont composés d'une ou de plusieurs espèces à une concentration bien définie, afin d'imiter les caractéristiques physico-chimiques et le comportement lors de la combustion et l'oxydation des carburants commerciaux.

Un carburant modèle représentatif d'un carburant commercial, donne l'accès au développement d'un modèle cinétique chimique qui offrira une meilleure compréhension de l'oxydation et de la combustion des hydrocarbures.

Les mécanismes cinétiques d'oxydation des carburants peuvent être utilisés pour prédire et analyser la formation d'une grande variété d'espèces intermédiaires et de produits, et de mieux comprendre les phénomènes tels que la vitesse de propagation de flamme ou les délais d'auto-inflammation. Un mécanisme cinétique est un système composé d'un certain nombre d'espèces chimiques impliquées dans un certain nombre de réactions chimiques. Il est développé et validé grâce à un ensemble de données expérimentales qu'il permettra de représenter. Il est important d'avoir un modèle cinétique qui peut prédire la combustion et l'oxydation des carburants dans les trois régimes de températures : basse température, haute température et coefficient négatif de température (NTC).

Ces mécanismes pourront offrir des prédictions relativement précises pour des intervalles plus larges d'opération dans le moteur. Leur utilisation devrait contribuer à améliorer l'efficacité, la performance, la consommation et les émissions polluantes des systèmes de combustion.

2.1 Généralités physico-chimiques des réactifs de départ.

Bien que tous les carburants modèles de type gazole ne doivent pas nécessairement être composés par des molécules représentatives du carburant commercial pour correspondre parfaitement à leur comportement réel lors de leur combustion, il est raisonnable de s'attendre à ce qu'un mélange de composants représentatif du carburant réel puisse offrir une meilleure concordance entre la combustion du carburant modèle et celle du carburant réel (commercial).

2.1.1 Composition chimique du gazole

Un gazole est la fraction de produits hydrocarbonés obtenus lors de la distillation du pétrole brut (après la fraction de kérosène) ; c'est un mélange très complexe de plusieurs milliers d'espèces différentes. Il existe une énorme variabilité dans les propriétés et fractions des composants des carburants de type gazole selon leur source d'extraction qui peut varier non seulement au niveau international, mais aussi au niveau régional et local. Pour cela, la nature du pétrole (Tableau 3) déterminera le processus adéquat à utiliser à la raffinerie.

Tableau 3. Qualité du pétrole brut (source : Secrétariat de la CNUCED)

Nom du pétrole	*Gravité API*[11]	*Teneur en soufre (% du poids total)*	*Appellation*
Brent	38	0,4	léger doux
West Texas Intermediate (WTI)	36,4	0,48	léger doux
Dubai	31	2,00	moyen sulfuré
West Texas Sour (WTS)	30,2	1,5	moyen sulfuré
Alaska North Slope (ANS)	24,8	1,04	moyen sulfuré

Les proportions entre les différentes familles chimiques peuvent sensiblement varier en fonction de la provenance du pétrole brut de départ. Ainsi, les composés paraffiniques (alcanes linéaires et ramifiés) représentent la composition la plus importante de la masse de gazole, suivi par les composés naphténiques (ou alcanes cycliques) et en dernière position les composés aromatiques. Sur la Figure 15 ci-dessous un exemple de composition massique d'un gazole commercial est présenté.

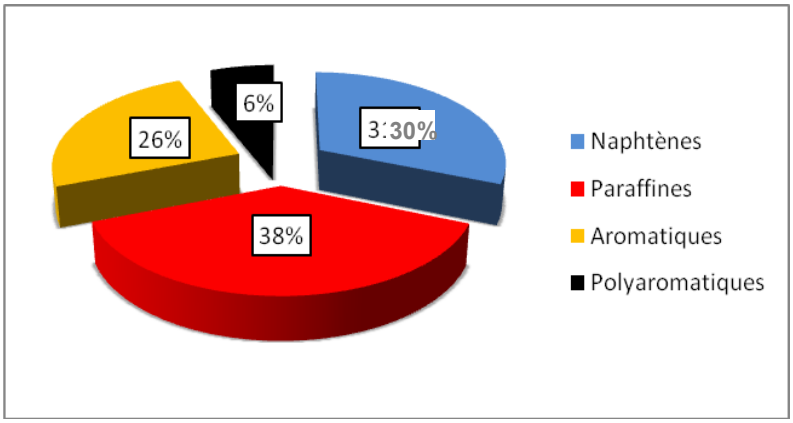


Figure 15. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un gazole commercial (*source Total*)

Les caractérisations analytiques détaillées de carburants de type gazole disponibles dans le commerce montrent une importante variabilité de composition entre les principales familles chimiques d'un gazole à l'autre. Dans la gamme de molécules du gazole provenant de la distillation du pétrole brut se trouvent les paraffines, les cycle-paraffines, et les molécules aromatiques. Les paraffines sont des chaînes droites (normale) et ramifiées (iso). Les iso-paraffines trouvées généralement dans un gazole sont très peu ramifiées et comprennent typiquement une ou deux substitutions de méthyle sur une longue chaîne carbonée (C_{10}-C_{24}). Les cyclo-paraffines ou naphtènes sont composées principalement d'un anneau de cyclohexane

[11] **La gravité API** (mesurée en degrés) est une approche de la densité du pétrole à une température de 15°C qui s'obtient d'après le calcul suivant: d° API= (141.5/densité relative)-131.5 où la densité relative est le rapport de la densité du pétrole sur la densité de l'eau. La gravité API de l'eau est arbitrairement fixée à 10 degrés. Ainsi, plus la densité d'un pétrole est faible, plus sa gravité API est élevée.

(ou deux anneaux dans une proportion mineure) avec plusieurs chaînes aliphatiques latérales. Les aromatiques, qui constituent entre 30 et 35% des molécules de gazole en moyenne, sont composées d'un (benzène) ou deux (naphtalène) cycles aromatiques également liées à des chaînes aliphatiques. Les aromatiques comme les indanes, les indènes, les acénaphtènes, les anthracènes et phénanthrènes peuvent aussi être présents dans le gazole fossile, mais leurs concentrations sont relativement faibles et susceptibles de diminuer avec l'ajout du bio-Diesel dans l'avenir.

2.1.2 Composition chimique du bio-Diesel

Comme pour les gazoles, les mélanges gazole/bio-Diesel présentent des variations importantes de leurs propriétés en fonction de la matière première et des procédés d'obtention. Ces propriétés sont fonction de l'indice de cétane, l'opération à froid T.L.F.[12] et la stabilité au stockage à long terme[13].

Les biocarburants provenant de ressources non conventionnelles, comme il a été mentionné dans le premier chapitre, sont actuellement principalement dédiées à l'utilisation en mélange avec les gazoles d'origine fossile. La structure moléculaire du bio-Diesel est très différente et plus homogène que celle du gazole dérivé du pétrole.

Les biocarburants sont obtenus à partir d'huiles extraites de plantes. Ainsi, les matières premières pour son obtention sont nombreuses : huiles de palme, de soja, de colza, etc. Ces huiles sont composées de triglycérides, c'est-à-dire de trois molécules d'acide gras estérifiées associées à une molécule de glycérol (Figure 16). Les acides gras sont des molécules linéaires, à longue chaîne, comportant souvent entre 16 et 24 atomes de carbone. Les chaînes peuvent présenter une ou plusieurs insaturations.

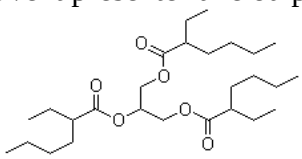


Figure 16. Glycerol tri-2-éthylhexanoate

Ces huiles sont composées de molécules de masse molaire, densité et viscosité importantes ; elles présentent une volatilité négligeable. Par exemple, l'huile de colza composée de grandes molécules d'acide gras, dont l'acide oléique (~ 58%m/m avec une masse molaire de 282,5 $g.mol^{-1}$), a une masse volumique (Tableau 4) à 15°C de 916 kg/m^3 et une viscosité de ~26 mm^2/s à 50°C, par rapport à ~820 kg/m^3 de masse volumique et ~2 mm^2/s à 40°C de viscosité pour un gazole conventionnel. Afin de s'approcher des propriétés du gazole, on leur fait subir une trans-estérification avec du

[12]Température Limite de Filtrabilité, température la plus élevée à laquelle un volume déterminé de combustible cesse de traverser, dans un temps limité, un appareil de filtration normalisé quand il est soumis à un refroidissement.

[13] Le vieillissement et l'oxydation du bio-Diesel peut conduire à l'augmentation de l'indice d'acide, à l'augmentation de la viscosité, et à la formation de sédiments qui bouchent les filtres. Si l'indice d'acide, la viscosité et les sédiments mesurés dépassent les limites de la norme ASTM D6751, le bio-Diesel est dégradé au point où il est hors de spécification et ne doit pas être utilisé.

méthanol afin de produire des esters méthyliques d'acide gras, ayant l'avantage d'être plus légers et moins visqueux.

Tableau 4. Propriétés physico-chimiques de l'huile de colza et du gazole.

	Huile de colza	Gazole
M. V. (kg/m³ à 15°C)	916	820 - 845
Viscosité (mm²/s)	25,7 à 50°C	2 - 4,5 à 40°C

Comme il a déjà été mentionné, le bio Diesel peut être produit commercialement à partir d'une large variété d'huiles et de graisses telles que l'huile végétale de soja, de tournesol, de colza, de coton, de palme, de noix de coco, etc. Par rapport au gazole, qui contient des milliers de composés, la composition chimique du bio-Diesel est plus simple. Elle est constituée d'esters méthyliques à longues chaînes carbonées. Ces chaînes d'acides gras peuvent avoir différents niveaux de saturation (saturées, mono-insaturées et poly-insaturées) lesquels, dans les limites des spécifications, peuvent affecter certaines propriétés du carburant bio-Diesel (
Figure 17).

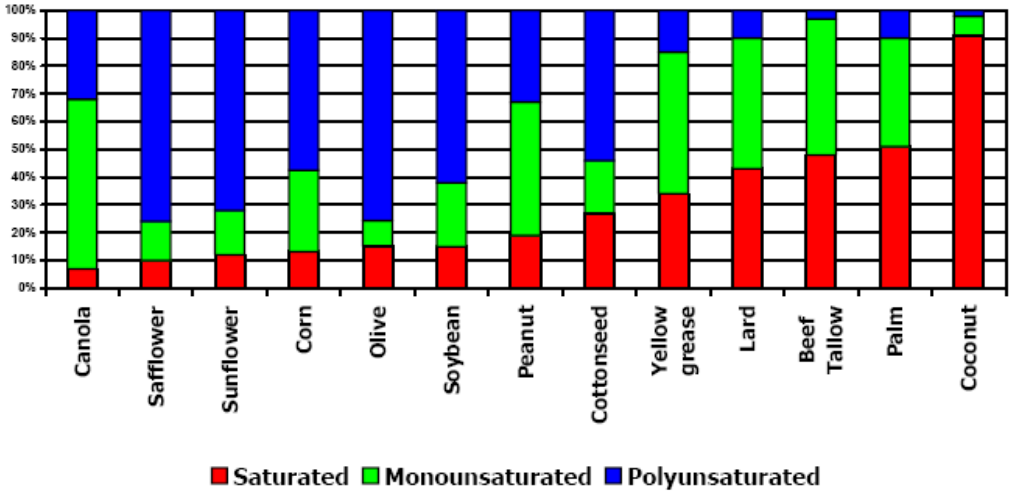


Figure 17. Composition des bio-Diesels en fonction de sa matière première (source DOE/GO-102006-2358 Third Edition September 2006).

Les molécules de **bio-Diesel** sont principalement des FAME (Fatty Acid Methyl Ester), obtenues à partir de la trans-estérification d'huiles végétales et de méthanol. Ces acides gras sont constitués d'une longue chaîne hydrophobe et une tête hydrophile. La partie hydrophobe consiste en une chaîne carbonée linéaire saturée ou insaturée. La partie hydrophile est la fonction ester située au début de la chaîne carbonée. Ces chaînes carbonées possèdent entre 16 et 20 atomes de carbone dans une proportion de plus de 90%, et entre 22 et 24 atomes de carbone dans une moindre proportion (Tableau 5).

Tableau 5. Composition massique de l'ester méthylique d'huile de colza Osmont 2007 .

Ester	Structure	%Masse
Palmitate de méthyle $C_{17}H_{34}O_2$		5,0
Stéarate de méthyle $C_{19}H_{38}O_2$		2,5
Oléate de méthyle $C_{19}H_{36}O_2$		59,0
Linoléate de méthyle $C_{19}H_{34}O_2$		21,0
α- Linolénate de méthyle $C_{19}H_{32}O_2$		9,0
Arachidate de méthyle $C_{21}H_{42}O_2$		1,0
Autres	-	2,5

Le bio-Diesel peut être mélangé avec du gazole dans différentes proportions (Figure 18). Cette manière de procéder offre l'avantage d'améliorer la capacité lubrifiante du mélange, celle-ci posant parfois problème avec la forte limitation du taux de soufre dans le gazole (les composés soufrés étant d'excellents lubrifiants). La nomenclature utilisée peut varier selon son pourcentage en volume de biocarburant dans le mélange. De cette façon, **B5, B10**, **B30** et **B50** correspondent aux nomenclatures où le nombre indique le pourcentage en volume du biocarburant dans le mélange, ou bien **B100** dans le cas du bio-Diesel pur.

Figure 18. Exemple de l'apparence optique d'un gazole fossile et ses mélanges avec du bio-Diesel (JME : Jatropha Methyl Ester). Schönborn 2009

Comme le montre le Tableau 6 ci-dessous, les esters, auront un impact positif sur la formation de particules et la pulvérisation par des injecteurs dans la chambre de combustion car la viscosité a une influence directe sur la qualité de l'injection du carburant et donc sur la taille et la répartition des gouttelettes dans la chambre de combustion. Pour cette raison, l'huile ne peut être utilisée que pour des moteurs standards sans forte turbulence alors que l'ester lui n'est aucunement contraignant (environ 7mm²/s à 20°C). De la même façon, la température limite de filtrabilité des huiles est proche de 0°C et donc bien supérieure à celle d'un gazole commercial, ce qui risque de nuire à l'opérabilité à froid du fait de la cristallisation et/ou du colmatage de filtre sur la ligne d'injection. La masse volumique des huiles végétales étant plus élevée, les émissions de particules seront dès lors plus importantes (dans un moteur non adapté). Grâce à cette masse volumique plus élevée, le faible pouvoir calorifique massique des huiles végétales est compensé (inférieure de près de 11,5% à celui des gazoles standards). Cependant, le faible indice de cétane des huiles peut augmenter la consommation, le bruit moteur et les émissions en HC, NOx et CO[14].

Tableau 6. Comparaison des propriétés de l'huile de colza, de l'ester méthylique de colza (EMC) et du Gazole (*source : RENAULT*).

	Huile de colza	***EMC***	***Gazole***	***Impact***
M.V. (kg/m^3 à 15°C)	916	880	820 - 845	Particules
Viscosité (mm^2/s)	25,7 à 50 °C	3,75 à 50°C	2-4,5 à 40°C	Pulvérisation
TLF France/Hiver (°C)	Non mesurable	-12	-15	Opération à froid
PCI (MJ/kg)	37,4	37,7	42,6	Perte
PCI (MJ/l)	34,3	33,2	35,8	Puissance
Distillation (% à350°C)		≥ 95	≥ 85	(−)
Indice de cétane	32-36	48,7	≥ 51	Consommation

Pour des caractéristiques physico-chimiques proches de celles du gazole conventionnel (Tableau 7), l'utilisation du bio-Diesel (en mélange) ne pose pas de problème majeur et ne nécessite en principe aucune modification du moteur, si ce n'est l'éventuel remplacement de certains joints et durites. En effet, le bio-Diesel pur est un excellent solvant et risquerait d'endommager certains joints en caoutchouc et autres mousses de polyuréthane, ainsi que certaines peintures.

[14] RENAULT DIM -DAPEM

Tableau 7. Spécifications des mélanges gazole-bio-Diesel

		Gazole EN590 (B5)		Gazole B10 (*)		Gazole B30 (**)	
Propriété	Unité	Mini	Maxi	Mini	Maxi	Mini	Maxi
Masse volumique	kg/m³	820	845	820	845	**820**	**900**
Distillation							
E250	% vol		65		65		65
E350	% vol	85		85		85	
T95	°C		360		360		360
Indice de cétane mesuré	-	51		51		**49**	
Indice de cétane calculé	-	46		46		**46**	
Teneur en soufre	mg/kg		50		50		50
Viscosité @ 40°C	mm²/s	2	4,5	2	4,5	**2**	**5**
P.T du 01/11 au 31/03	°C		-5		-5		**-3**
du 01/04 au 31/10	°C		5		5		**5**
T.L.F du 01/11 au 31/03	°C		-15		-15		**-10**
du 01/04 au 31/10	°C		0		0		**0**
Stabilité à l'oxydation	g/m³		25		25		25
Teneur en eau	mg/kg		200		200		200
Contamination totale	mg/kg		24		24		24
Point d'éclair	°C	55		55		55	
Teneur en cendres	% masse		0,01		0,01		0,01
Résidu de carbone	% masse		0,3		0,3		0,3
Corrosion cuivre	-	Classe 1		Classe 1		Classe 1	
Polyaromatiques	% masse		11		11		11
Lubrifiance @ 60°C	µm		460		460		460

(*) spécification proposée par la DIREM (France)
(**) spécification interne à TOTAL pour un B30 en 2006

2.2 Composition chimique d'un gazole contenant du bio-Diesel

Comme il a été indiqué précédemment, les propriétés du bio-Diesel peuvent être sensiblement différentes de celles du gazole conventionnel. Le mélange de bio-Diesel dans du gazole est une façon de minimiser ces différences de propriétés, tout en conservant certains avantages du bio-Diesel. Les mélanges sont composés de milliers de molécules hydrocarbonées et oxygénées. On peut classer ces espèces en fonction des familles chimiques auxquelles elles appartiennent ou en fonction du nombre d'atomes de carbone qui les composent.

2.2.1 Composition d'un mélange par famille chimique

Sur l'exemple présenté en Figure 19, on peut observer qu'aux trois grandes familles d'espèces chimiques qui composent un gazole, il faut ajouter une nouvelle famille d'espèces oxygénées. Ainsi, les composés paraffiniques (ramifiés ou non) représentent plus de 50% de la masse pour un B10. Les composés naphténiques diminuent par rapport au gazole de 30 à 26%, ainsi que les aromatiques, qui passent de 26 à 15%. Le pourcentage des espèces oxygénées dépendra de la concentration de FAME dans le carburant.

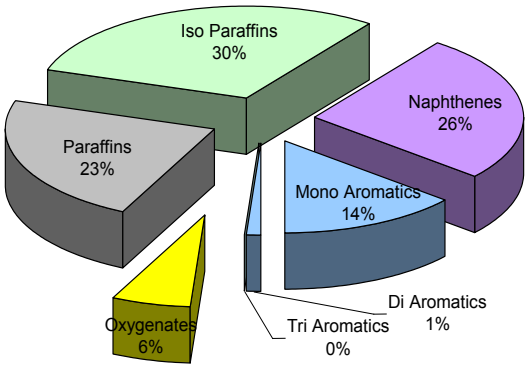


Figure 19. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un B10 commercial (*source SGS*).

2.2.2 Composition d'un mélange en fonction du nombre d'atomes de carbone

Le graphe ci-dessous représente la distribution en nombre d'atomes de carbone par famille chimique d'un carburant commercial B10. Les molécules les plus légères qui ont été détectées contiennent moins de 7 atomes de carbone et, pour les composés les plus lourds, plus de 29 atomes de carbone (Figure 20). La plus grande proportion en masse de carburant est composée de molécules contenant entre 10 et 19 atomes de carbone.

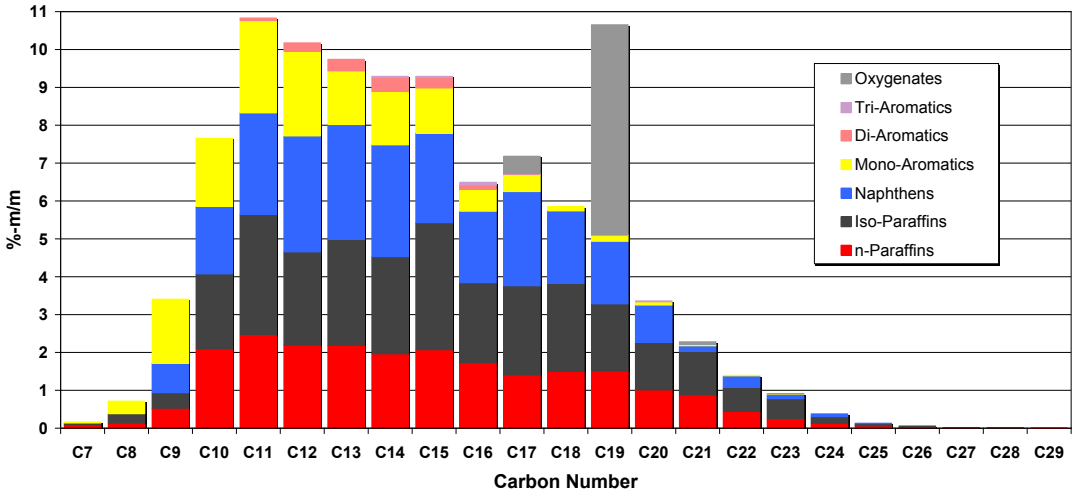


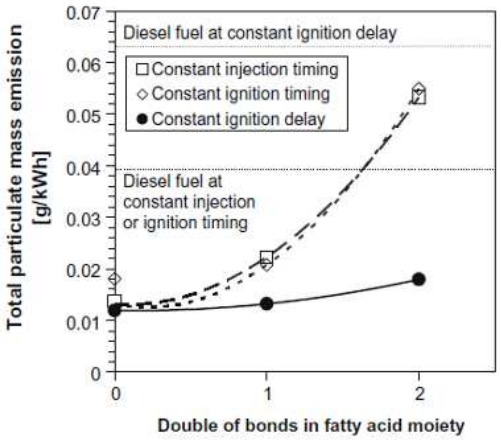
Figure 20. Analyse détaillée des hydrocarbures composant un carburant B10. Distribution par famille chimique (*source SGS/RENAULT*).

2.3 Effet de la structure moléculaire des esters d'acides gras sur la combustion du gazole

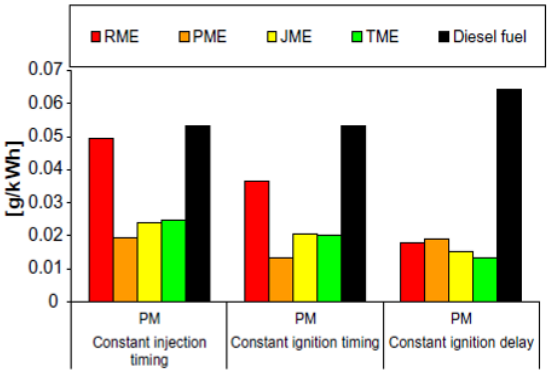
La combustion du bio-Diesel dans les moteurs Diesel a tendance à entraîner une baisse des émissions de particules, d'hydrocarbures imbrûlés et de monoxyde de carbone (CO) par rapport au gazole fossile, avec une légère augmentation des émissions d'oxydes d'azote (NOx).

Schönborn *et al.* 2009 ont étudié avec plus de détail l'influence de la structure moléculaire des esters de méthyle sur la combustion dans des conditions de fonctionnement d'un moteur du type Diesel. Ils ont observé que la structure moléculaire du carburant influençait fortement la formation de NOx et de particules, et leur concentration dans les gaz d'échappement. Ainsi, les émissions de particules augmentent avec le nombre de doubles liaisons et la taille de la molécule (Figure 21).

Les molécules moins saturées ont une plus grande disposition chimique à former de la suie, car les insaturations moléculaires offrent la possibilité à l'éthylène et l'acétylène (éthyne) de se former lors de leur décomposition thermique, tous les deux connus comme précurseurs de suie. Mais en général et pour plusieurs expériences, la combustion du gazole fossile produit beaucoup plus de particules que tous les différents échantillons de bio-Diesel étudiés par Schönborn *et al.* 2009, ce qui peut être attribué à sa plus faible teneur en composés oxygénés.



(a)



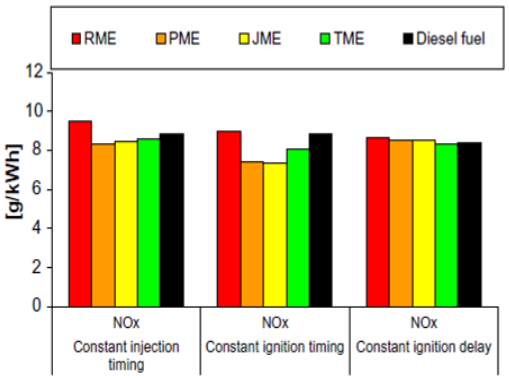
(b)

Figure 21. Emission des particules (a) en fonction du nombre d'insaturation sur la chaîne carbonée et (b) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique d'huile de colza (RME).

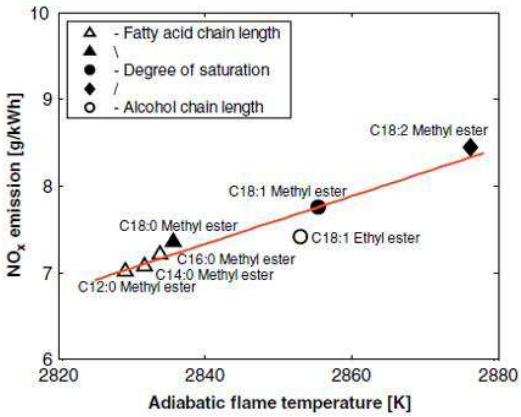
Ils ont également attribué le faible taux d'émission d'imbrûlés du carburant bio-Diesel à sa haute inflammabilité et, ainsi, à son court délai d'auto inflammation. La réduction des émissions de CO est généralement expliquée par une richesse plus pauvre.

Siva Kumara et al. 2009 ont étudié les émissions de CO de plusieurs mélanges de bio-Diesel issus de l'huile de coton avec du gazole fossile (B10, B20, B30). Grâce aux teneurs en oxygène du bio-Diesel, les émissions de CO se sont montrées moins importantes au fur et à mesure que la quantité de bio-Diesel augmentait dans le mélange gazole/bio-Diesel. Le gain en CO d'un B30 en comparaison avec un gazole fossile était de 24%.

Zhang *et al.* 2009 se sont intéressés à l'effet de la position de la double liaison dans la chaîne aliphatique d'ester d'acide gras. Ils ont analysé le comportement à l'allumage de quatre esters d'acide gras C_9 différents: nonanoate d'éthyle, nonanoate de méthyle, 2-nonénoate de méthyle et 3-nonénoate de méthyle. Les résultats ont montré que ces quatre acides gras présentaient des caractéristiques d'allumage moteur très différentes. Ainsi, lorsque l'insaturation s'approche du centre de la chaîne aliphatique, l'ester d'acide gras présente une baisse de réactivité se manifestant par un retard à l'allumage, un plus faible dégagement de chaleur et une formation prématurée de CO_2. Ces effets ont été clairement observés dans le régime de combustion à basse température.



(a)



(b)

Figure 22. Emission de NOx (a) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique d'huile de colza (RME) et (b) en fonction de la température de flamme adiabatique de différents esters d'acides gras. Schönborn 2009

Les émissions élevées de NOx provenant de la combustion du bio-Diesel peuvent être expliquées grâce à quelques hypothèses, comme par exemple, le fait que généralement le bio-Diesel contient plus de double liaisons ou insaturations qu'un gazole fossile (Figure 22). Ces doubles liaisons induisent une température adiabatique

de flamme légèrement plus élevée que pour des composés saturés, ce qui conduit à l'augmentation de la production de NOx thermiques avec le bio-Diesel. Ceci pourrait être aussi attribué à une plus forte propension du bio-Diesel à former des radicaux hydrocarbonés dans des zones riches de flammes prémélangées, conduisant à une formation de prompt-NO. De plus, Cheng *et al.* 2006 ont observé qu'en général, lorsqu'un bio-Diesel produit moins de suie qu'un gazole conventionnel, on peut s'attendre à observer une plus grande production de NOx avec le bio-Diesel. Cette théorie suggère que la température de flamme du bio-Diesel peut être plus élevée que celle du gazole fossile via la baisse du transfert de chaleur radiatif des suies produites dans la flamme du bio-Diesel

2.4 Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures

Les mécanismes cinétiques d'oxydation des hydrocarbures sont le résultat de nombreuses études consacrées à la modélisation détaillée de l'oxydation d'un grand nombre de molécules de carburant. On peut citer les travaux concernant l'oxydation du *n*-heptane et de l'iso-octane, Ranzi *et al.* 1995, Curran *et al.* 1998 et Curran *et al.* 2002 . L'utilisation de ces mécanismes doit permettre une meilleure compréhension du processus de combustion à l'intérieur des moteurs. Ayant pour but d'améliorer sa performance et son efficacité. Ces mécanismes contiennent plusieurs centaines d'espèces qui participent à des milliers de réactions élémentaires.

Curran et ses collaborateurs ont regroupé tous les mécanismes de réaction pertinents en deux groupes globaux : hautes et basses températures. Les conventions utilisées dans la description des mécanismes sont les suivantes :

- $R^{\bullet}$ dénote les radicaux alkyles ou les espèces $C_n H_{2n+1}$
- R' ou Q dénote les espèces $C_n H_{2n}$
- R'' ou Q' dénote les espèces $C_n H_{2n-1}$

2.4.1 Mécanisme d'oxydation à basses températures

Il s'agit de processus faiblement exothermique ayant lieu à des températures en dessous de 800K environ (Curran *et al.* 1998). La réaction la plus importante de ce schéma d'oxydation consiste en l'addition d'oxygène moléculaire aux radicaux alkyles suite à la réaction d'arrachement d'un atome d'hydrogène de l'hydrocarbure initial :

$$R\dot{\circ}^{\bullet} + O_2 \leftrightarrow RO_2\dot{\circ}$$

Dans la Figure 23 les voies de réaction à basse température sont décrites plus en détail.

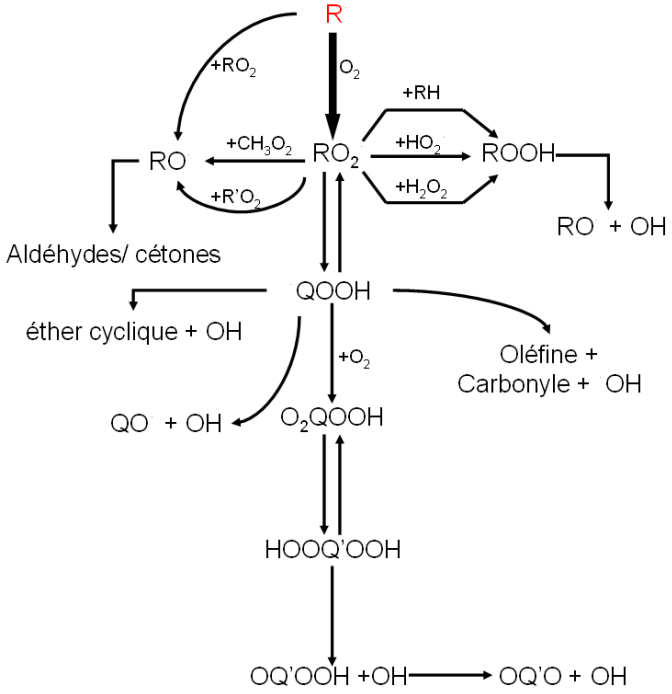


Figure 23. Voies de réaction à base température (Griffiths *et al.* 1995).

Le schéma développé comprend les processus suivants :

1. Addition d'oxygène moléculaire aux radicaux alkyles.

$$R^{\bullet} + O_2 \leftrightarrow RO_2\dot{O}^{\bullet}$$

2. Réaction des radicaux alkyles avec les radicaux alkylpéroxy.

$$R^{\bullet} + RO_2\dot{O}^{\bullet} \rightarrow RO^{\bullet} + RO\dot{O}^{\bullet}$$

3. Isomérisation de radicaux alkylpéroxy

$$RO_2^{\bullet} \leftrightarrow {}^{\bullet}QOOH$$

4. Réaction de radicaux RO_2 avec des espèces actives.

$$RO_2\dot{O}^{\bullet} + HO_2^{\bullet} \leftrightarrow ROOH + O_2$$

$$RO_2\dot{O} + H_2O_2 \leftrightarrow ROOH + HO_2^{\bullet}$$

$$RO_2\dot{O}^{\bullet} + CH_3O_2 \leftrightarrow RO^{\bullet} + CH_3O^{\bullet} + O_2$$

$$RO_2^{\bullet} + R'O_2 \leftrightarrow RO^{\bullet} + R'O^{\bullet} + O_2$$

5. Rupture homolytique O−O de ROOH.

$$ROOH \leftrightarrow RO^{\bullet} + OH^{\bullet}$$

6. Décomposition de radicaux alcoxy.

$$RO^{\bullet} \rightarrow \text{aldéhydes ou cétones}$$

7. Décompositions du radicaux QOOH.

$$QOOH \leftrightarrow QO^{\bullet} + OH^{\bullet}$$

$$^{\bullet}QOOH \leftrightarrow \text{Oléfine} + \text{Carbonyle} + OH^{\bullet}$$

$$^{\bullet}QOOH \leftrightarrow \text{éther cyclique} + OH^{\bullet}$$

8. Addition de QOOH à l'O_2

$$^{\bullet}QOOH + O_2 \leftrightarrow O_2QOOH$$

9. Isomérisation de O_2QOOH

$$^{\bullet}O_2QOOH \leftrightarrow HOOQ'OOH$$

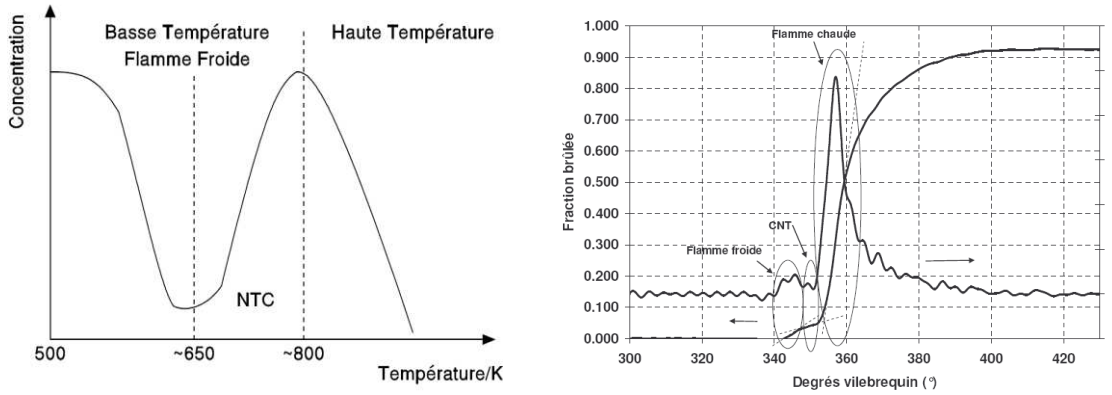
10. Rupture homolytique O−O de HOOQ'OOH

$$HOOQ'OOH \rightarrow OQ'OOH + OH^{\bullet}$$

11. Décomposition des cétohydropéroxides.

$$OQ'OOH \rightarrow OQ'O + OH^{\bullet}$$

Entre la cinétique d'oxydation à basse et haute températures, il existe une zone nommée « **Coefficient Négatif de Température** », **NTC** (Figure 24). Dans cette zone la réactivité diminue à cause du ralentissement de réactions de ramification avec l'augmentation de la température (Ristori 2000). Cela veut dire que l'équilibre des réactions 1, 3 et 8 est, respectivement, déplacé vers la gauche entraînant une diminution de la production de radicaux $OH^{\bullet}$.



(a) (b)

Figure 24. (a)Variation de la concentration du carburant en fonction de la température mettant en évidence l'évolution des mécanismes d'oxydation avec la température. (b) Fraction brûlée du carburant et dégagement d'énergie en fonction du degré vilebrequin (Alséda 2007).

Dans la zone CNT les réactions dominantes sont :

$$QOOH \leftrightarrow QO^{\bullet} + OH^{\bullet}$$

$$R^{\bullet} + O_2 \rightarrow \text{Alcènes} + HO_2^{\bullet}$$

$$HO_2^{\bullet} + HO_2^{\bullet} \rightarrow H_2O_2 + O_2$$

Le processus de ramification se met en place lorsque la température est assez haute pour démarrer le mécanisme d'oxydation à hautes températures.

2.4.2 Mécanisme d'oxydation à hautes températures

Le schéma développé pour la cinétique d'oxydation à hautes températures inclut les réactions suivantes (Figure 25) :

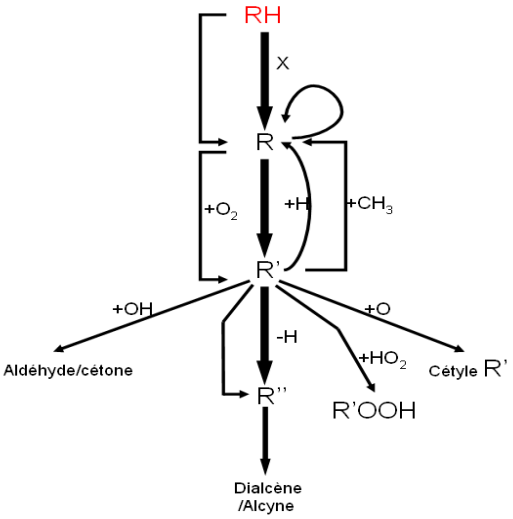


Figure 25. Voies de réaction à hautes températures (Griffiths *et al.* 1995).

1. Décomposition unimoléculaire du carburant.

$$RH \rightarrow R^{\bullet} + H^{\bullet}$$
$$RH \rightarrow R^{\bullet} + R^{\bullet}$$

2. Arrachement de l'atome d'H à partir du carburant.

$$RH + X \rightarrow R^{\bullet} + XH$$

où X représente un radical actif (H, O, OH, HO_2, CH_3, etc.).

Les radicaux HO_2, formés dans la zone de coefficient négatif de température, avec l'augmentation de température de réaction donnent suite à une augmentation de la réactivité (Ristori 2000). Le processus de ramification établi est :

$$RH + HO_2 \rightarrow R^{\bullet} + H_2O_2$$

$$H_2O_2 + M \rightarrow OH^{\bullet} + OH^{\bullet} + M$$

Les deux radicaux OH libérés vont attaquer les molécules de carburant, permettant à la cinétique d'oxydation de celui-ci d'augmenter fortement.

3. Décomposition de radicaux alkyle.

$$R^{\bullet} \rightarrow R' + H^{\bullet}$$

De plus, les radicaux H réagissent avec l'oxygène pour produire des radicaux $O^{\bullet}$ et OH qui, comme il a déjà été mentionné, augmentent la vitesse d'oxydation du carburant :

$$H^{\bullet} + O_2 \rightarrow OH^{\bullet} + O^{\bullet}$$

Cette réaction dite de ramification multiplie les centres actifs ; elle est responsable de l'emballement réactionnel.

4. Oxydation de radicaux d'alkyles pour former une oléfine et HO_2.

$$R^{\bullet} + O_2 \rightarrow R' + HO_2$$

5. Isomérisation de radicaux alkyles.

$$R^{\bullet}_1 \rightarrow R^{\bullet}_2$$

6. Arrachement d'H à partir d'oléfines.

$$R' + X \rightarrow R'' + XH$$

Où X représente un radical actif.

7. Addition d'espèces radicalaires aux oléfines.

$$R' + H^{\bullet} \rightarrow R^{\bullet}$$

$$R' + CH_3^{\bullet} \rightarrow R^{\bullet}$$

$$R' + O^{\bullet} \rightarrow \text{radical carbonyle} + R^{\bullet}$$

Par exemple : $C_2H_4 + O^{\bullet} \rightarrow CHO + CH_3^{\bullet}$

$$R' + OH \rightarrow \text{Aldéhyde/carbonyle} + R^{\bullet}$$

Par exemple : $C_3H_6 + OH^{\bullet} \rightarrow CH_2O + C_2H_5$

$$R' + HO_2^{\bullet} \rightarrow R'OOH$$

8. Décomposition de radicaux oléfiniques.

$$R'' \rightarrow \text{Diène ou alcyne}$$

9. Décomposition d'oléfines.

$$R' \rightarrow R'' + R^{\bullet}$$

2.5 Composés purs utilisés comme carburant modèle

Les carburants modèles sont des mélanges constitués d'un ou plusieurs hydrocarbures. Ces mélanges ont une composition définie et reproductible. Ces carburants modèles sont une représentation simplifiée des carburants réels. Les modèles de combustion des carburants modèles doivent être capables d'offrir une bonne reproductibilité du comportement du carburant réel (commercial) lors de sa combustion avec des temps de calcul raisonnables.

Des expériences avec des carburants modèles sont particulièrement utiles quand il s'agit de limiter la complexité de la chimie et/ou de la physique du carburant et avoir un aperçu des processus tels que la vaporisation, le mélange, l'allumage, et la formation de polluants lors de la combustion de ce carburant « cible ».

Les carburants modèles impliquent une ou deux molécules de chaque famille chimique constituant le carburant (paraffines, iso-paraffines, naphtènes et aromatiques). Elles sont choisies aussi en fonction des propriétés physico-chimiques du carburant à représenter. En général, les mélanges des carburants modèles développées pour l'essence ou le gazole doivent remplir les conditions suivantes (Battin-Leclerc 2008):

- Faisabilité : Les molécules candidates doivent avoir fait l'objet d'études établissant leurs mécanismes cinétiques détaillés d'oxydation.

- Simplicité : Principalement pour des raisons de temps et de capacité de calcul, les mélanges modèles doivent être composés par des molécules « simples » qui représentent les familles chimiques principales des carburants. Par exemple : paraffines avec moins de 12 atomes de carbone, paraffines

monocycliques avec moins de huit atomes de carbone, et aromatiques comme le benzène, le naphtalène et des alkylbenzènes.

- Similarité : Il est nécessaire que le nouveau mélange ait des propriétés physiques et chimiques semblables au carburant : volatilité (comme le point d'ébullition et le point éclair) ; formation des suies ; propriétés de combustion (comme la chaleur de combustion et les limites d'inflammabilité) ; etc.

- Coût et disponibilité : Dans le cas des carburants modèles de type gazole, la présence de paraffines de plus de 12 atomes de carbone et de composés naphténiques pourraient être envisagée. En bref, il est nécessaire d'évaluer le coût de la formulation du nouveau mélange modèle, la possibilité d'utiliser les principaux dispositifs nécessaires à la création de bases de données expérimentales (e.g. tube à choc, machine à compression rapide, brûleur, réacteur auto-agité) et les outils de modélisation.

La plupart des carburants modèles de type gazole, en particulier ceux qui contiennent plus d'un composant avec une masse molaire moyenne similaire à celle d'un gazole réel, sont très limités à cause du manque de données expérimentales pour bien développer, valider et simuler la cinétique chimique du mélange multi-composants.

Durant cette étude, on a cherché à imiter à travers deux mélanges multi-composants les propriétés physico-chimiques fondamentales, de deux types de carburants, i.e. le gazole et le B30, tels que le rapport hydrogène / carbone (H/C), qui peut être facilement adapté avec des carburants modèles très simples, mais qui ne garantit pas forcément un comportement proche du carburant cible lors de sa combustion. De la même façon, on a cherché à représenter la composition chimique des carburants réels (comme le pourcentage de paraffines, aromatiques et oxygénés). Les molécules choisies présentent des points d'ébullition qui se trouvent dans les bornes de températures de distillation de carburant réels

En plus de cibler quelques propriétés physico-chimiques du gazole et du B30, on a également développé notre schéma cinétique à partir de la validation de nos hypothèses dans des appareils avec des conditions contrôlées tels qu'un réacteur auto-agité (JSR) où la formation d'espèces a été mesurée dans un large intervalle de température ; le tube à choc, où les délais d'auto inflammation ont été mesurés ; et enfin une bombe sphérique, dans laquelle les vitesses fondamentales de flamme ont été déterminées. Cependant, pour compléter notre cadre de validation il resterait nécessairement l'application dans un cas moteur. Ainsi, la flamme froide, le dégagement de chaleur et enfin, la combustion moteur pourraient être comparés avec les résultats de calculs utilisant le carburant modèle correspondant.

En fonction de l'objectif de l'application choisie, des carburants modèles d'un seul composant peuvent suffire mais ils ne peuvent pas s'approcher d'un carburant réel avec précision. Par exemple, le *n*-heptane a longtemps été un des carburants modèles les plus utilisés mais les imprécisions sur les effets d'allumage, la formation de polluants, et les richesses des carburants font de lui un carburant modèle très peu

utiles aux simulations CFD (Farrell *et al.* 2007). Par conséquence, des carburants modèles composés de 2 ou 3 espèces ont été développés. Dans le tableau ci-dessous nous présentons quelques exemples de carburants modèles (« surrogates ») :

Tableau 8. Quelques exemples de carburants modèles développées dans des modèles cinétiques.

Carburant réel	Carburant modèle	ρ (g/mL) à 293 K	Indice de cétane	Famille chimique
Essence*	*n*-heptane C_7H_{16}	0,684	56	Paraffines
	Iso-octane	0,688	–	Iso-paraffines
	Iso-octane/ toluène/ 1-hexène/ETBE[15]	~0,690		Iso-paraffines/aromatiques
	1-hexène/toluène	~0,685		Paraffines/aromatiques
	1-hexène/iso-octane	~0,685		Paraffines/iso-paraffines
Gazole**	*n*-cétane	0,773	100	Paraffines
	1-Methylnaphtalène	1,001	0	Poly- aromatiques
	0,7 *n*-décane/ 0,3 1-Methylnaphtalène	0,817	55	Paraffines/ aromatiques
	n-décane/ n-propylcyclohexane/n-butylbenzène	0,778		Paraffines/ naphtènes/ aromatiques
	n-décane/ n-butylbenzène	0,774		Paraffines/aromatiques
	n-décane/ n-propylcyclohexane	0,750		Paraffines/ naphtènes
Bio-Diesel***	Octanoate de méthyle	0,890	33.6	Esters
	Decanoate de méthyle	0.871	47.7	Esters

* Curran *et al.* 1998; Su *et al.* 2005; Curran *et al.* 2002 ; Yahyaoui *et al.* 2007; Yahyaoui *et al.* 2007 et Vanhove *et al.* 2006.
**[Mati *et al. 2005*] ; Mati *et al.* 2007 et Diévart 2008.
***Silke *et al.* 2007; Herbinet *et al.* 2008 et HadjAli et al. 2009.

Avec l'amélioration des systèmes informatiques et l'augmentation de la puissance mémoire des calculateurs, les chercheurs se tournent vers les hydrocarbures à plus longues chaînes et des mélanges plus complexes qui permettent de prédire, avec une meilleure précision le comportement de carburant. Les hydrocarbures comme le n-décane et les mélanges *n*-décane/aromatiques, tels que le toluène et le méthylnaphtalène, font partie de quelques exemples utilisés pour la modélisation de gazoles et de carburéacteurs (kérosènes).

[15] Ethyle Tertio-Butyle Ether

2.5.1 Oxydation du *n*-décane

La cinétique d'oxydation des *n*-paraffines a été largement étudiée en concentrant les efforts, dans un premier temps, sur les petites espèces (comme par exemple le propane, le *n*-butane, puis le *n*-heptane) puis sur les espèces caractéristiques de celles présentes dans un carburant type gazole. A la suite de la consolidation de ces premiers mécanismes, le développement et la validation de la cinétique détaillée ont concerné des n-paraffines plus grandes et représentatives des gazoles réels tels que le *n*-décane, *n*-dodécane, le *n*-tetradécane et le *n*-hexadécane. Parmi eux, le *n*-décane a reçu la plus grande attention et une grande variété de données expérimentales ont été utilisées pour le développement et la validation de ces modèles cinétiques.

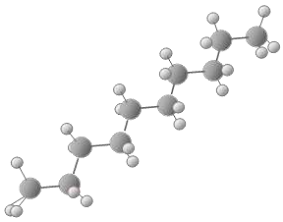


Figure 26. Molécule de *n*-décane

Les premières études sur les mécanismes d'oxydation d'hydrocarbures lourds, par Balès-Guéret *et al*., en 1997, ont concerné l'oxydation du *n*-décane dans un réacteur auto-agité pour un intervalle de températures compris entre 873 et 1033 K, à pression atmosphérique. Les principaux hydrocarbures intermédiaires détectés étaient : l'éthylène, le propène, le méthane, le 1,3-butadiène et l'éthane.

Plus tard, en 1994, Dagaut et al. ont étudié, dans un réacteur auto-agité, l'oxydation du n-décane entre 550 et 1150 K, à 10 bar, pour des temps de passage moyens compris entre 0,5 et 1 s et des richesses comprises entre 0,1 et 1,5. Leur mécanisme détaillé donne une bonne description des profils d'espèces à des températures au dessus de 800 K.

Douté *et al.* (1997) ont mesuré sur un brûleur à flamme plate la structure d'une flamme pré-mélangée de *n*-décane/O_2/N_2, pour une richesse de 1,7. Ils ont décrit en détail la consommation de molécules d'hydrocarbures et les réactions de quelques radicaux. Ce mécanisme comprend 78 espèces et 638 réactions.

De leur côté, Pfahl *et al.* (1996) ont étudié dans un tube à choc à haute pression les délais d'auto-inflammation des mélanges *n*-décane/air. La particularité de ce tube à choc a été son système de chauffage permettant d'éviter la condensation des hydrocarbures lourds. Les délais d'auto-inflammation ont été déterminés entre 700 et 1300 K à 13 bar, pour des richesses de 0,5, 1,0 et 2,0. Ils ont aussi travaillé entre 700 et 1000K à 50bar, pour des richesses de 0.67, 1,0 et 2,0.

Zeppieri et al. (2000) ont mis au point, sur la base de résultats obtenus dans un réacteur à écoulement turbulent, un mécanisme pour l'oxydation et la pyrolyse du *n*-

décane. Ce mécanisme a aussi été validé pour l'oxydation du *n*-décane dans un réacteur auto-agité et dans un tube à choc.

Tableau 9. Oxydation du *n*-décane

Conditions expérimentales			Réacteur	Résultats	Référence
T (K)	P (bar)	φ			
550-1150	10 ; 40	0,1-1,5	auto-agité	Profils d'espèces	Dagaut *et al.* 1994
873;1033	1	0,2-1,5	auto-agité	Profils d'espèces	Bales-Gueret *et al.* 1997
900-1150	1	0,5-2,0	auto-agité	Profils d'espèces	Ristori 2000
900-1300	1	0,5-2,0	auto-agité	Profils d'espèces	Dagaut *et al.* 2006
550-1150	10	0,25-0,5	auto-agité	Profils d'espèces	Diévart 2008
550-1100	1	1	auto-agité	Profils d'espèces	Biet *et al.* 2008
1060	1	∞	à écoulement turbulent	Profils d'espèces	Zeppieri *et al.* 2000
1019	1	1			
700-1300	13 ; 50	0,5-2	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Pfahl *et al.* 1996
1450-1550	1	1	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Horning *et al.* 2002
1239-1616	1,8-10	0,7-3	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation Profils d'espèces	Olchanski *et al.* 2006
800-1300	13 ; 80	0,5 et 1	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Zhukov *et al.* 2008
1345-1537	5-6	0,5-1,3	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Skjoth-Rasmussen *et al.* 2003
473	1	0,8-1,3	Brûleur	Vitesse de flamme	
300	1	0,6-1,4	Brûleur	Vitesse de flamme	Zhao *et al.* 2005
473	1	1,7	Brûleur	Structure de flamme	Delfau *et al.* 1991
473	1	1,7	Brûleur	Structure de flamme	Doute *et al.* 1997

Plusieurs auteurs effectuent chaque année de nouveaux travaux de recherche pour le développement et l'amélioration du mécanisme cinétique de combustion du *n*-décane : Horning *et al.* (2002); Zhao *et al.* (2005); Biet *et al.* (2008) Zhukov *et al.* (2008); Olchanski et Burcat (2008) ; Diévart (2008) entre autres. Leurs expériences, ont été menées pour les différents régimes d'oxydation et à différentes richesses, à l'aide de réacteurs auto-agités, réacteurs à écoulement, brûleur et tube à choc.

Dans les tableaux ci-dessus figure la liste des principaux travaux qui ont contribué pendant les vingt dernières années au développement du mécanisme d'oxydation du *n*-décane.

2.5.2 Oxydation du 1-méthylnaphtalène

Les composés aromatiques sont une des principales familles chimiques constituantes des carburants d'origine fossile. Comme indiqué précédemment, ils peuvent constituer plus du 30% en volume d'un carburant type gazole. Hautement toxiques, ces composés aromatiques régulent l'indice de cétane[16] exigé pour le bon fonctionnement du moteur Diesel. Les espèces aromatiques jouent également un rôle crucial dans la formation des suies car ils sont les précurseurs des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP). C'est pourquoi, la compréhension de leurs mécanismes réactionnels est importante pour modéliser la cinétique d'oxydation des carburants. Par conséquence, inclure un composé aromatique dans un carburant modèle multi-composant est essentiel pour la compréhension et la simulation de la chimie d'oxydation des gazoles conventionnels.

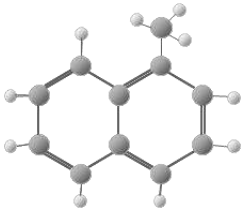


Figure 27. Molécule d' 1-méthylnaphtalène

Peu d'études ont porté sur l'oxydation du 1-méthylnaphtalène ou α-méthylnaphtalène. Puisque très peu de mesures directes et d'analyses théoriques sont disponibles, beaucoup des données cinétiques pour les espèces de di-aromatiques sont dérivées des données disponibles pour les composés mono-aromatiques correspondants (Narayanaswamy *et al.* 2010). Ainsi, par exemple, des constantes cinétiques pour l'oxydation du naphtalène sont supposées être égales à celles du benzène et de la même manière, celles pour le méthylnaphtalène sont supposées être les mêmes que celles du toluène.

En 1985, Litzinger *et al*. ont étudié l'oxydation du 1-méthylnaphtalène à 1180K, dans un réacteur à écoulement, pour une richesse de 0,25. Il a été observé comme espèces intermédiaires : le naphtalène, l'indène, le phénylacétylène et le benzène.

Un des premiers mécanismes cinétiques détaillés a été proposé par Pitsch 1996. Ce mécanisme permet de décrire la perte du groupe méthyle, l'oxydation du naphtalène et du benzène, et la formation d'HAP (hydrocarbures aromatiques polycycliques). Le modèle a été validé en utilisant des données obtenues dans un

[16] Un indice de cétane trop élevé (>60) permet un démarrage plus facile à froid, mais avec un mauvais rendement thermodynamique. Accroître l'indice de cétane au-delà de 50-55 augmenterait le coût de fonctionnement moteur. Par contre, un indice de cétane trop bas rendrait le démarrage à froid plus difficile, une augmentation au niveau du bruit de moteur, et à long terme, des graves endommagements mécaniques (érosion du piston par exemple)

réacteur à écoulement turbulent et un tube à choc. Cependant, des incertitudes concernant la description de vitesses de réaction utilisées dans ce système ne permettent pas son utilisation.

Plus tard, en 1997 Shaddix *et al.,* ont proposé des voies de consommation du 1-méthylnaphtalène, dans un réacteur à écoulement piston, d'après l'évaluation des concentration d'espèces intermédiaires (comme les radicaux H, 1-naphtyle méthyle et méthyle). Les expériences ont été menées à pression atmosphérique, entre 1160 et 1170K et pour les richesses de 0,58; 1,0 et 1,5. La même année, Marchal a étudié la cinétique d'oxydation du 1-méthylnaphtalène. Ses expériences ont été réalisées dans un réacteur auto-agité, à 10 bar et à la stœchiométrie. Il a observé également des espèces légères telles que le méthane, l'éthylène, et l'acétylène.

Au CNRS d'Orléans, les travaux menés par Mati *et al.* (2007), faisant suite aux travaux de Ristori *et al.* en 2000, ont montré que la réactivité du 1-méthylnaphtalène à basse température est faible, quelque soit la pression. Ils ont aussi montré que les produits majoritaires d'oxydation consistent en des espèces di-aromatiques telles que le naphtalène ($C_{10}H_8$) et le naphtaldéhyde ($C_{10}H_7HCO$). Egalement, ils ont développé un mécanisme pour l'oxydation du 1-méthylnaphtalène comportant 146 espèces et 1041 réactions, où la plupart sont réversibles.

Tableau 10. Oxydation du 1-méthylnaphtalène.

Conditions expérimentales			**réacteur**	**résultats**	**Référence**
T (K)	**P (bar)**	**φ**			
1180	1	0,25	écoulement	Profils d'espèces	Litzinger *et al.* (1985)
1075	1	1	écoulement	Profils d'espèces	Mikolajczak *et al.* 1996
1160-1200	1	0,6-1,5	écoulement	Profils d'espèces	Shaddix *et al.* 1997
800-1100	10	1	auto-agité	Profils d'espèces	Marchal 1997
800-1421	1-10	0,5-1,5	auto-agité	Profils d'espèces	Mati *et al.* 2007
840-1300	13	1	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Pfahl *et al.* 1996
1032–1445	8–45	0,5-1,5	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Wang *et al.* 2010

Comme on peut le constater, peu de travaux ont été menés pour l'oxydation du 1-méthylnaphtalène. Un des derniers travaux publiés a été réalisé par Wang *et al*. en 2010. Ces expériences ont servi à valider un mécanisme cinétique développé pour des mélanges *n*-décane/1-methylnaphtalène. En plus de nos travaux en JSR (Ramirez L *et al.* 2010) publiés au cours de la même année, Narayanaswamy *et al*. ont développé à l'Université de Stanford un mécanisme d'oxydation des espèces aromatiques validé pour un grand nombre de données expérimentales.

2.5.3 Oxydation des esters méthyliques

Avec la croissante incorporation de biocarburants dans les carburants réels, les composés oxygénés (les esters d'acide gras ou les alcools) attirent l'intérêt de scientifiques, de sociétés pétrolières et de constructeurs automobiles, pour mieux comprendre leur comportement lors de leur combustion.

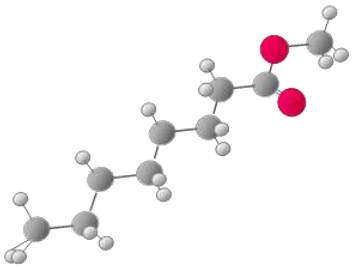


Figure 28. Schéma représentatif d'une molécule d'octanoate de méthyle

Le butanoate de méthyle a été choisi initialement comme molécule modèle pour la compréhension de l'oxydation des esters méthyliques de longue chaîne. Un des schémas cinétiques pionniers, pour les carburants modèles type bio-Diesel, a été proposé par Fisher *et al*. en 2000. Ils ont développé un modèle cinétique et thermodynamique qui décrivait l'oxydation du butanoate de méthyle et du formiate de méthyle. Ce schéma a été validé sur la base de données obtenue à basse température et basse pression. Cependant, le modèle n'était pas complet. Il était seulement capable de prédire des données qualitatives à cause du peu de résultats expérimentaux disponibles.

En 2007, Gaïl *et al.* ont étudié et validé un mécanisme de combustion du butanoate de méthyle au moyen d'un réacteur auto-agité, d'une flamme de diffusion à jets opposés et d'un réacteur à écoulement (VPFR, Princeton). Ainsi, avec les nouvelles données expérimentales, ils ont modifié l'ancien schéma cinétique et proposé un nouveau mécanisme comportant 295 espèces et 1498 réactions. Malgré cela, ce nouveau mécanisme n'arrivait pas à reproduire la réactivité observée en réacteur auto-agité, entre 850 et 1050K. Plus récemment, Metcalfe *et al.* ont étudié l'oxydation du butanoate de méthyle et du propanoate d'éthyle dans un tube à choc.

Ces mécanismes ont montré que la compétition entre la décomposition unimoléculaire et la ramification des chaînes dépendent de la température. Cette dépendance est similaire à celle observée pour les alcanes. Il restait encore à étudier les effets d'insaturation et de longueur de la chaîne carbonée.

Ainsi, Sarathy *et al.* (2007) et Gaïl *et al.* (2008) ont effectué une étude expérimentale de l'oxydation du méthyle crotonate ($C_5H_8O_2$ ou buténoate de méthyle) dans un réacteur auto-agité et dans une flamme de diffusion à jets opposés afin de comprendre le rôle de la double liaison.

Tableau 11. Oxydation des Méthyle esters

Carburant	Conditions expérimentales			réacteur	résultats	Référence
	T (K)	P (bar)	Φ			
Butanoate de méthyle et formiate de méthyle	520-740	0,13-0,54	0,65 et 0,1	Réacteur statique isothermique	Profils d'espèces	Fisher *et al.* 2000
Butanoate de méthyle	800-1350	1,13	1,01	auto-agité	Profils d'espèces	Gaïl *et al.* 2007
	500-900	0,35-1,5	1,01	Brûleur	Structure de flamme	
	500-900	0,35-1,5	12,7	Réacteur à pression variable (VPFR)	Profils d'espèces	
Crotonate de Méthyle et butanoate de méthyle	–	1	MB or MC, 4.7%; O_2, 42%	Brûleur	Structure de flamme	Sarathy *et al.* 2007
Crotonate de Méthyle	850-1400	1	0,375-0,75	auto-agité	Profils d'espèces	Gaïl *et al.* 2008
Decanoate de méthyle	790-1040	1	0,5-1	auto-agité	Profils d'espèces	Herbinet *et al.* 2008
Hexanoate de méthyle	500–1000	10	0,5-1,5	auto-agité	Profils d'espèces	Dayma *et al.* 2008
Heptanoate de méthyle	550-1150	10	0,6-2,0	auto-agité	Profils d'espèces	Dayma *et al.* 2009
Propanoate de éthyle	750-1100	10	0,3-2,0	auto-agité	Profils d'espèces	Metcalfe *et al.* 2009
	1000-1700	1-4	0,5-1,0	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	
Octanoate de méthyle	650 - 850	4-20	1	Machine à compression rapide	Délais d'auto-inflammation	HadjAli *et al.* 2009

De nouvelles recherches ont vu le jour et des expériences plus récentes ce sont concentrées sur des esters méthyliques à plus longue chaîne. Ainsi, en 2008 Herbinet *et al.* ont développé un mécanisme détaillé de l'oxydation du décanoate de méthyle. Ce modèle a été comparé avec des résultats de l'oxydation des esters méthyliques d'huile de colza obtenus précédemment et, il est capable de prédire la formation de CO et de CO_2 dans la zone froide. Un an après, en 2009, Dayma *et al.* ont développé un mécanisme de combustion détaillé de l'heptanoate de méthyle. Il s'agit d'une version révisée du modèle précédent d'oxydation de l'hexanoate de méthyle (2008) qui compte 1087 espèces et 4592 réactions réversibles. Enfin, en 2010, Togbé a présenté un mémoire de thèse où il a étudié l'oxydation en réacteur agité par jets gazeux de 11 esters méthyliques (du butanoate de méthyle au décanoate de méthyle)

et un ester éthyliques (propanoate d'éthyle). Certains de ses travaux ont été publiés et apparaissent dans le tableau précédent.

Pour l'instant, tous ces modèles ont encore besoin d'une validation avec des résultats issus du tube à choc ou de la machine à compression rapide. De plus, les systèmes proposés doivent être étendus à la modélisation de variétés d'esters méthyliques plus proches des esters présents dans les combustibles commerciaux.

2.5.4 Oxydation des mélanges *n*-décane/ 1-méthylnaphtalène

Face à la complexité de la composition des carburants réels, et au défi de la mise au point de modèles de substitution capables de simuler le comportement réel des carburants, des mélanges contenant un nombre limité de composants et reproduisant efficacement leur comportement ont été recherchés.

Pitsch, en 1996, lors de ses recherches pour le développement d'un mécanisme détaillé du 1-méthylnaphtalène, a suggéré l'utilisation d'un mélange *n*-décane/1-méthylnaphtalène pour représenter le gazole car la teneur en aromatiques dans les carburants réels contribue de manière significative à la formation de suie. Ensuite, Pfahl *et al*. (1996) ont étudié, dans un tube à choc chauffé à une température d'opération de 150°C, l'auto-inflammation du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène. D'après ces études préliminaires et avec l'objectif d'améliorer la représentation des propriétés physiques du gazole par des carburants modèles, Pfahl et Adomeit en 1997 ont formulé et étudié pour la première fois les délais d'auto-inflammation d'un mélange 70% *n*-décane/30% 1-méthylnaphtalène pour un intervalle de température allant de 770 à 1100K, une richesse de 1, à 13 et 50 bar. Ces travaux ont été menés dans le cadre du Projet Européen IDEA (Integrated Diesel European Action). Les résultats de ces recherches ont démontré que les délais d'auto-inflammation étaient très proches de ceux du *n*-heptane mais avec des propriétés physiques similaires à celles d'un gazole conventionnel (Tableau 12): une masse volumique dans des conditions standard de 798 kg/m^3, un indice de cétane de 55 et un rapport H/C de 1,7.

Tableau 12. Propriétés physico-chimique d'IDEA fuel comparées à celles du gazole

Propriétés	$C_{10,3}H_{18,4}$	Gazole	Impact
H/C	**1,7**	**1,8**	-
M (kg,kmol)	**142**		-
M,V, (kg/m 3)	**798**	**820 - 845**	Particules
PCI (MJ/kg)	**≤ 44,240**	**42,6**	Puissance
Indice de cétane $C_{10}H_{22}$ $C_{11}H_{10}$	**55**	**≥51**	Comsom.

Barths *et al.* 1999, ont simulé en 3D la combustion et la formation des polluants dans un moteur Diesel à injection directe en utilisant un carburant modèle à deux composant (70/30 *n*-décane/ 1-méthylnaphtalène) qu'ils ont appelé *IDEA-fuel*. Ils ont introduit un modèle de chimie de cet *IDEA-fuel* pour simuler des « flamelettes ». Ils ont utilisé un mécanisme comprenant 118 espèces et 557 réactions, incluant une réaction pour la formation de NO et une description détaillée de la formation des HAP à partir du mécanisme du benzène. Pour la validation de ce modèle, ils ont utilisé des résultats d'expériences issus d'un moteur Diesel Volkswagen DI 1900, i.e. des délais d'allumage, la pression maximale (Figure 29), le dégagement de chaleur, le couple et la formation des polluants (Figure 30).

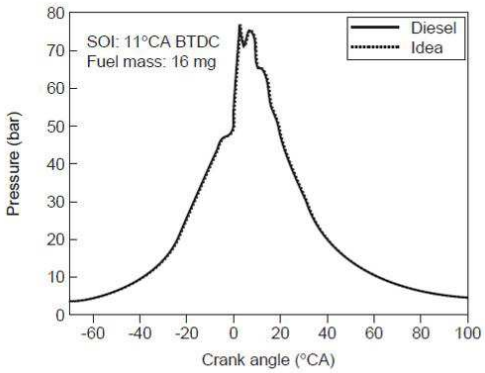


Figure 29. Comparaison des pressions obtenues pour un gazole et un IDEA-fuel. Barths *et al.* 1999.

Les expériences ont également montré que les tendances des émissions de l'IDEA-fuel étaient semblables à celles d'un gazole réel avec une légère sous-estimation en NOx (3-7%) et en suie (10-30%) par rapport au gazole fossile (Figure 30a et b).

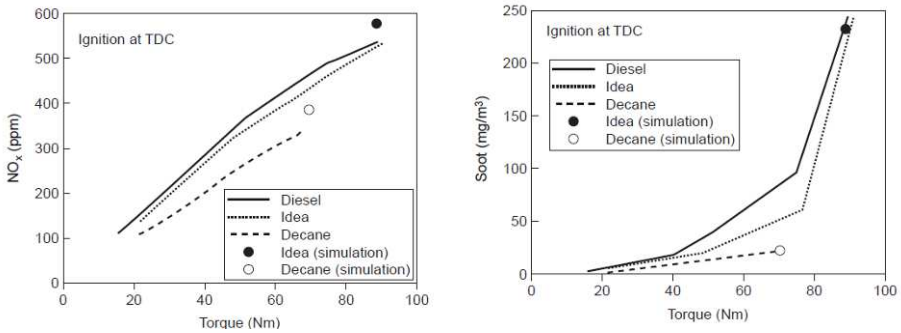


Figure 30. Concentration dans les gaz d'échappement de a) NOx et b) Suie pour différents carburants. Barths *et al.* 1999.

Quelques mois plus tard Barths *et al.* 2000, ont mis au point une nouvelle stratégie pour simuler la distribution et la subdivision en flammelettes. Cette étude a été menée en utilisant un mécanisme de combustion composé de 109 espèces et 519 réactions élémentaires, basé sur les mêmes données expérimentales que précédemment. Bien que des efforts aient été déployés pour le développement de la cinétique d'oxydation de l'IDEA-*fuel*, son mécanisme n'a jamais été publié.

Au cours de l'année 2010, et en parallèle de nos travaux en JSR (Ramirez L *et al*. 2010) pour le même carburant modèle, Wang *et al*. ont développé un mécanisme de 3864 réactions et 662 espèces pour les mélanges *n*-décane/ 1-méthylnaphtalène validé sur des expériences en tube à choc. Le sous-mécanisme du 1-méthylnaphtalène utilisé dérive des travaux de Mati *et al.* (2007).Le Tableau 13 présent un aperçu des expériences d'oxydation de *n*-décane/ 1-méthylnaphtalène.

Tableau 13. Oxydation des mélanges *n*-décane/ 1-méthylnaphtalène

Hydrocarbure	Conditions expérimentales			réacteur	résultats	Référence
	T (K)	P (bar)	φ			
n-décane	700-1500	13	0,5-2,0	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Pfahl *et al.* 1996
1-méthylnaphtalène	800-1300	13	1			
30/70% vol 1-méthylnaphtalène/ *n*-décane	770-1100	13 et 50	1	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Pfahl *et al.* 1997
30/70% vol 1-méthylnaphtalène/ *n*-décane	848–1349	14-62	1	Tube à choc	Délais d'auto-inflammation	Wang *et al.* 2010
70/30% vol 1-méthylnaphtalène/ *n*-décane						

Les études réalisées jusqu'à présent font référence au développement du modèle cinétique et seul un mécanisme sur l'oxydation des mélanges *n*-décane/1-méthylnaphtalène en phase gazeuse a été récemment publié dans la littérature.

Nos travaux nous ont menés dans un premier temps à développer un mécanisme pour les mélanges *n*-decane/ 1-méthylnaphtalène −expliqué avec plus de détails dans le troisième chapitre− en ayant comme base les résultats expérimentaux de la littérature. Nous avons donc choisi d'étudier deux carburants modèles : (i) un mélange *n*-décane /1-méthylnaphtalène pour représenter le gazole conventionnel, et (ii) un mélange *n*-décane/1-méthylnaphtalène/ octanoate de méthyle pour représenter les mélanges gazole/bio-Diesel (Tableau 14).

Tableau 14. Propriétés physico-chimiques de carburant modèle B30 comparées à celles du B30

Propriété	$C_{9.91}H_{18.28}O_{0.6}$	B30	Impact
H/C	**1,9**	**1,9**	-
M (kg/kmol)	**146,8**	**-**	-
M.V. (kg/m 3)	**820**	**850**	Particules
PCI (MJ/kg)	**≤ 44.240**	**42**	Puissance
Cetane no. $C_{10}H_{22}$ $C_{11}H_{10}$ $C_9H_{18}O_2$	76 0 33.6 ~ 48	**51**	Comsom.

Applications de la Cinétique Chimique Détaillée

La Figure 31 résume le présent chapitre. Ainsi, pour la formulation d'un carburant modèle et la validation de sa cinétique détaillée il est nécessaire :

- De faire d'abord une sélection d'un nombre minimum d'espèces représentatives des familles chimiques présentes dans le carburant.

- De formuler les carburants modèles en ciblant les propriétés physico-chimiques et le comportement de la combustion des carburants réels.

- D'obtenir une grande quantité de données expérimentales pour chaque composant primaire, des différents mélanges du carburant modèle formulé ainsi que des carburants réels.

- De développer, d'optimiser et de coupler les mécanismes détaillés de toutes les espèces choisies.

- De valider le mécanisme résultant avec les données expérimentales des carburants modèles, ainsi que de le revalider avec les résultats obtenus pour les composés primaires du mélange.

- De développer différentes méthodes (réductions et tabulation de la chimie) pour des **applications spécifiques** des données cinétiques dans un modèle de combustion 3D complexe.

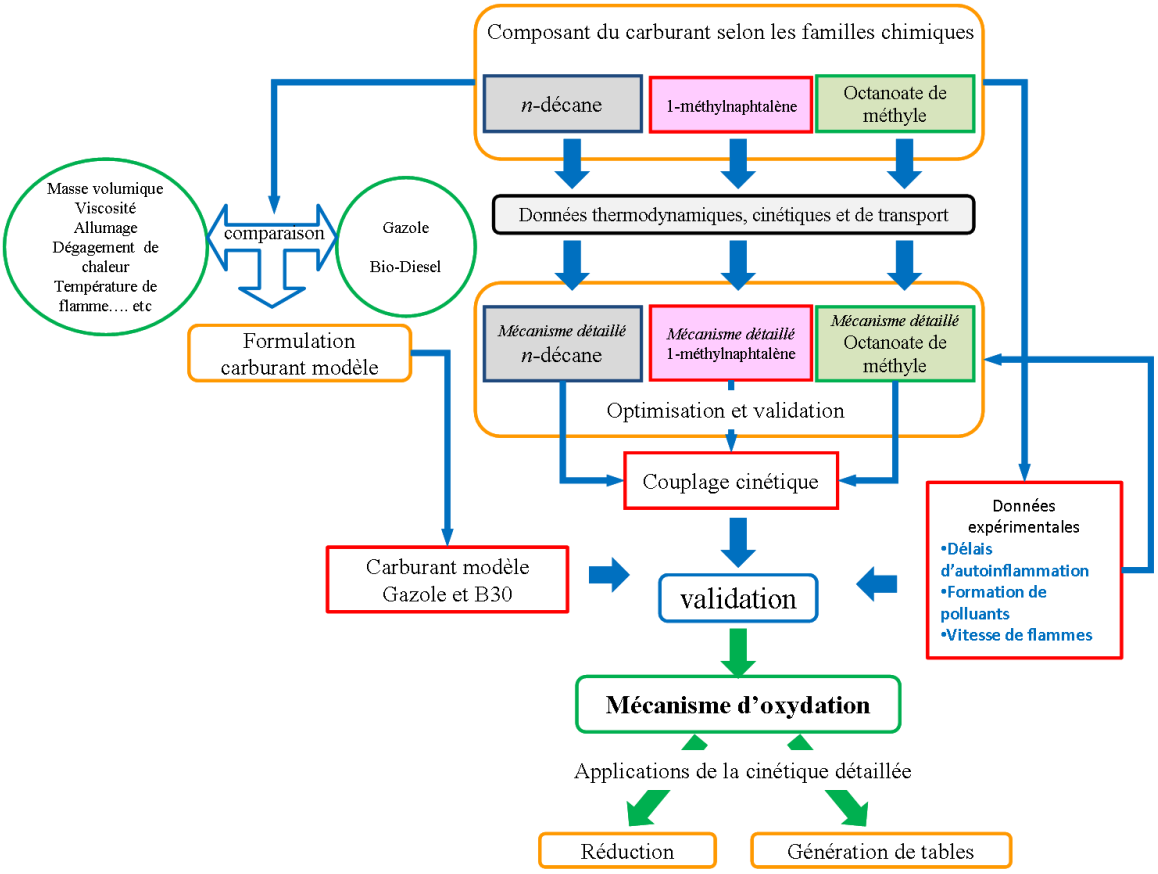


Figure 31. Consolidation d'un mécanisme détaillé pour la combustion des carburants de type gazole.

Des travaux ont été consacré à l'élaboration de stratégies pour adapter la chimie détaillée aux calculs CFD ; les méthodes les plus connues sont (Embouazza *et al.* 2002):

- Une réduction de mécanisme
- Une réduction automatique de dimensions
- Une tabulation de données (stockage et recherche de données)

La réduction classique d'un mécanisme détaillé consiste à réduire la taille −en espèces et en réactions− en utilisant une ou plusieurs techniques, comme par exemple l'élimination du régime de la flamme froide ou en évaluant l'importance de chaque espèce et de chaque réaction dans le flux réactionnel. Cette méthode exige un aperçu de la physique, tels que la vitesse de flamme ou le délai d'auto-inflammation (calculé avec les différents logiciels de calcul comme CHEMKIN), dans la cinétique chimique en donnant comme résultat un schéma réduit valide, seulement pour un nombre limité de conditions thermodynamiques (pression, température, richesse).

La réduction automatique des dimensions utilise la mathématique formelle (Maas *et al.* 1992) ou des méthodes heuristiques pour identifier les paramètres de contrôle dans un flux réactionnel complexe.

Dans la tabulation des données cinétiques, on prend en compte les incréments dans la composition chimique (delta de concentration de quelques espèces référence) au cours du temps. Les résultats calculés avec le mécanisme détaillé (ou réduit) sont stockés dans une base de données multidimensionnelle, qui les récupère pour les remplacer dans des intégrations directes du code CFD. Ainsi, dans une fine malle avec des conditions thermodynamiques définis le code CFD cherchera ou interpolera les paramètres nécessaires pour alimenter les équations du mouvement. Ces bases de données ont pour inconvénient de générer des erreurs d'interpolation et aussi une très grande demande de stockage des tableaux (Tang *et al.* 2002).

Darabiha *et al.*[17], entre autres, ont mis au point des techniques de tabulation de la cinétique chimique de type FPI (Flame Prolongation of Low Dimensional Manifold ILDM) couplées aux approches RANS (Reynolds Average Navier Stokes) et à la LES (Large Eddy Simulation) pour mieux comprendre la stabilisation des flammes et la formation des émissions de polluants. Ainsi, la prise en compte de la cinétique chimique par des technique FPI a permis de modéliser avec précision la chimie détaillée avec de faibles coûts (faibles temps de calcul).

Comme indiqué dans plusieurs travaux de recherche dans le monde, les simulations de la dynamique des fluides (CFD) qui intègrent la dynamique des fluides et la chimie sont d'une grande utilité dans la conception des dispositifs réels de combustion, y compris le moteur Diesel, le moteur HCCI, et les moteurs à réaction. Ces simulations peuvent aussi accélérer le développement de nouvelles technologies énergétiques, par exemple, la pile à combustible à oxyde solide, et le reformage d'hydrocarbures.

Enfin, le développement de nouvelles méthodes pour rendre accessibles ces mécanismes de plus en plus complexes est un sujet de recherche poursuivi activement.

[17] http://www.em2c.ecp.fr/combustion/c2

Conclusion

Les carburants à la pompe sont des mélanges complexes constitués de milliers de molécules. Compte tenu de cette complexité, les carburants modèles peuvent être constitués d'une ou deux molécules représentatives de chaque famille chimique constitutive du carburant (paraffines, iso-paraffines, naphtènes et aromatiques), choisies en fonction des propriétés physico-chimiques du carburant à représenter. Pour cette étude, les corps choisis comme carburant modèle pour les mélanges gazole/biodiesel ont été : le *n*-décane (représentant les paraffines), le 1-méthylnaphtalène (représentant les aromatiques) et l'octanoate de méthyle (représentant les esters méthyliques). Comme on a pu le constater dans la littérature, il existe de nombreuses études expérimentales portant sur l'oxydation du *n*-décane contrairement au 1-méthylnaphthalène et à l'octanoate de méthyle. Pour les carburants modèles composés de plus de deux composants, les données expérimentales dans la littérature sont encore plus rares. Ceci est dommageable car, maintenant, avec les normes de pollutions de plus en plus restrictives pour les véhicules neufs, le besoin de représenter les carburants réels avec une bonne précision devient indispensable en termes d'émissions polluantes et de particules.

Pour cette étude, on a utilisé deux carburants modèles : (i) un premier pour modéliser un carburant gazole composé d'environ 70% de la masse du carburant puisque seules les familles présentes sont les paraffines et les aromatiques (ii) et un autre pour un mélange réel gazole/bio-Diesel B30 qui représente environ 75% de la masse du carburant puisque les familles présentes sont les paraffines, les aromatiques et les esters méthyliques.

Chapitre 3

Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de gazole, bio-Diesel B30 et de carburants modèles en réacteur auto-agité.

Dans le présent chapitre, une étude de la cinétique d'oxydation des carburants réels et modèles a été réalisée en réacteur auto agité JSR (Jet Stirred Reactor). Il est organisé en deux parties principales. Dans une première partie, les profils de concentrations d'espèces,issues de l'oxydation d'un gazole fossile et d'un carburant modèle type gazole (IDEA-fuel) ont été mesurés et comparés avec l'objectif de vérifier l'accord entre la cinétique chimique d'oxydation du carburant modèle de type gazole (carburant IDEA) et d'un gazole réel (commercial). De la même façon, dans la deuxième partie de ce chapitre, les profils de concentrations des espèces mesurés lors de l'oxydation d'un carburant réel B30 et un carburant modèle B30 (composé de 70%$_{mol}$ de IDEA-fuel plus 30%$_{mol}$ d'octanoate de méthyle) sont présentés et comparés. Ces expériences impliquant des carburants réels et modèles ont aussi pour objectif de fournir de nouvelles données expérimentales sur leur cinétique d'oxydation afin de valider des mécanismes de cinétique détaillée dans une large gamme de températures et pressions.

3.1 Description du réacteur auto-agité JSR

Les profils de concentration des espèces résultant de l'oxydation de carburants ont été mesurés dans un réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR). Ce réacteur est un des dispositifs du laboratoire ICARE à Orléans ; il fait partie d'une gamme d'équipements utilisés dans les études de combustion. Le réacteur utilisé dans cette étude, est identique à celui présenté dans les travaux précédents de Dagaut *et al*. (Dagaut *et al*. 1986, Mati *et al*. 2007, Mati *et al*. 2007).

Le JSR a été initialement conçu à partir des travaux de Matras et Villermaux (1973) et David et Matras (1975). Ce réacteur fonctionne en régime permanent, isobare et isochore, où les jets gazeux turbulents sortants vers des directions opposés garantissent un mélange 'parfait'. La grande dilution des réactifs entraîne une faible exothermicité[18].

[18] La température mesurée dans le réacteur est utilisée dans les simulations.

Comme le montre la Figure 32, ce réacteur est constitué principalement d'une sphère en silice fondue (matériau qui limite les réactions aux parois) de 33 cm^3 de volume, avec quatre injecteurs de 1 mm de diamètre interne. Ces injecteurs sont opposés deux à deux afin de rendre l'ensemble du mélange gazeux homogène. Il est aussi équipé d'une sonde sonique en silice fondue pour les prélèvements d'échantillons gazeux et d'un thermocouple (0,1 mm, Pt/Pt-Rh 10%, gainé de quartz) ; l'ensemble est mobile selon l'axe vertical du réacteur.

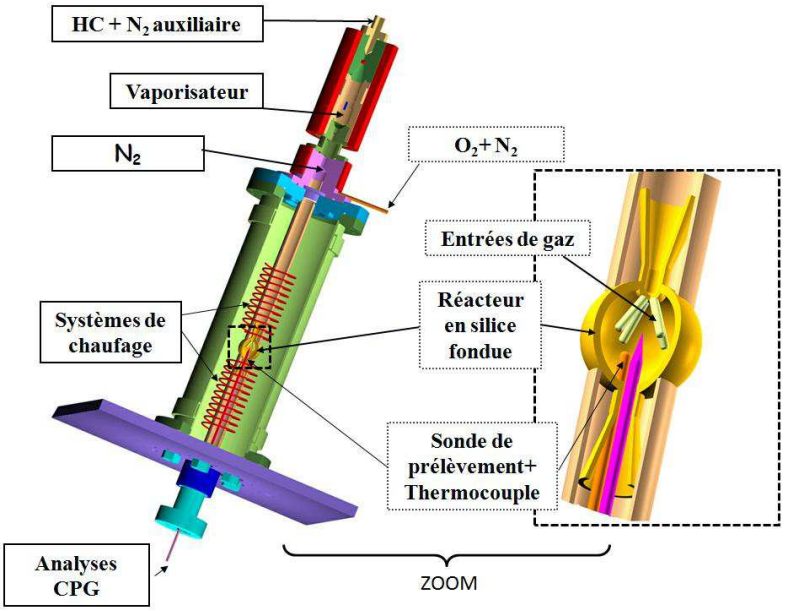


Figure 32. Réacteur auto-agité par jets gazeux (ou Jet Stirred Reactor, JSR).

Le réacteur est placé dans un four électrique qui fournit une puissance d'environ 2x1.5kW. Un isolant thermique (Kerlane) est utilisé afin de limiter les pertes thermiques. Le préchauffage permet d'éviter les risques de condensation dans le capillaire d'introduction. Cet ensemble réacteur-four permet de travailler dans un domaine de pression allant de 1 à 40 bar, à des températures de 300 à 1300 K avec une faible concentration en carburant ($\leq$ 0.1%) évitant l'apparition de flamme.

Les expériences réalisées avec ce dispositif ont permis de suivre l'évolution des concentrations d'espèces chimiques (réactifs, produits intermédiaires stables, produits de fin de réaction) en fonction de la température, à une pression et un temps de passage fixés. Ces expériences ont été réalisées dans un premier temps à 10 bar pour des carburants fossiles et les carburants modèles, et dans un deuxième temps à 6 bar uniquement pour les carburants modèles.

3.1.1 Principe de fonctionnement

Un réacteur auto-agité est un réacteur CSTR (Continuously Stirred Tank Reactor) en phase gazeuse, équipé de quatre jets gazeux dirigés en sens opposé, et qui alimentent

le réacteur de façon turbulente. La vitesse de conversion des réactifs en produits est alors majoritairement contrôlée par les processus chimiques.

Le temps nécessaire pour que la composition en sortie du réacteur soit la même n'importe où dans le milieu réactionnel est appelé le temps de passage τ, défini par le rapport du volume du réacteur sur le débit volumique.

$$\tau = \frac{V_r}{Q} \cdot \frac{T_{amb}}{T} \cdot \frac{P}{P_{atm}}$$

Où :

τ	est le temps de passage moyen des gaz (s)
Vr	est le volume du réacteur (m^3)
Q	est le débit volumétrique total à l'entrée du réacteur (m^3/s)
Tamb	est la température ambiante (K)
T	est température imposée (K)
Patm	est la pression ambiante (bar)
P	est la pression imposée (bar)

Ainsi, le débit partiel de chaque réactif pourra être calculé grâce aux fractions molaires initiales de chaque réactif et le débit volumique total, avec l'expression :

$$Q_i = X_i \cdot Q = X_i \cdot \frac{V_r}{\tau} \cdot \frac{T_{amb}}{T} \cdot \frac{P}{P_{atm}}$$

Tous les débits gazeux sont contrôlés au cours des expériences par des débitmètres massiques et par une pompe HPLC pour les hydrocarbures liquides. Ces derniers sont calculés via l'équation :

$$Q_{HC} = X_{HC} \cdot Q \cdot \frac{P_{atm}}{T_{amb}} \cdot \frac{M_{HC}}{\rho_{HC} R}$$

Après l'injection du carburant, un flux d'azote de 100 l/h (azote auxiliaire) prend le relai en poussant le carburant vers un orifice annulaire pour permettre son atomisation. L'hydrocarbure entre alors sous forme de très fines gouttelettes dans une enceinte maintenue à une température supérieure à son point d'ébullition pour permettre sa vaporisation. Le mélange gazeux azote-hydrocarbure ainsi constitué est acheminé par un tube capillaire en silice fondue jusqu'à la zone de mélange où il rencontrera le flux azote- oxygène. On notera que ces deux flux, préchauffés, sont conduits par deux circuits parallèles pour éviter toute réaction prématurée avant d'arriver au sein du réacteur.

Afin de maintenir une différence de pression minimale entre l'extérieur et l'intérieur du réacteur, un débit contrôlé d'azote circule à l'extérieur du réacteur.

Comme indiqué auparavant, les prélèvements s'effectuent au moyen d'une sonde mobile sonique positionnée à 1cm en amont de la sortie du réacteur. La sonde est maintenue sous vide tout au long de l'expérience, et chauffée pour éviter la condensation des produits lourds. Lors du prélèvement, le pompage est stoppé. L'échantillon est prélevé à une pression aux environs de 50 torrs. La différence de pression entre les gaz au sein du réacteur et la sonde de prélèvement permet de figer la réaction et ainsi d'obtenir un mélange gazeux représentatif des gaz dans le réacteur. Les échantillons provenant du réacteur peuvent être analysés en ligne par spectrométrie infrarouge, ou en parallèle par chromatographie en phase gazeuse couplée à un spectromètre de masse (GC/MS) et des détecteurs à ionisation de flamme et catharomètre.

3.1.2. Techniques d'analyse des gaz

Etant donné la complexité des mélanges prélevés au sein du réacteur, différents chromatographes sont nécessaires pour la séparation, l'identification et la quantification d'une large gamme de produits.

La chromatographie en phase gazeuse a été employées en ligne et en parallèle pour permettre le dosage de l'hydrogène et l'oxygène ; ainsi que celui des composés hydrocarbonés légers (moins de 7 carbones), lourds et oxygénés. Tous les chromatographes utilisés ont été calibrés à l'aide d'étalons externes. La spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier a été utilisée en ligne, permettant le dosage de CO, CO_2, CH_4, CH_2O, C_2H_4, et C_2H_2.

La **chromatographie en phase gazeuse (GC)** est une technique qui permet la séparation des molécules des mélanges très complexes qui rentrent dans une colonne constituée d'une phase solide ou liquide (phase stationnaire). Le mélange est transporté à travers cette colonne à l'aide d'un gaz vecteur ou les différentes molécules vont se séparer les unes après les autres à différentes périodes, en fonction de l'affinité de la phase stationnaire avec les molécules du mélange.

Les colonnes utilisables diffèrent selon les caractéristiques physicochimiques des produits à analyser. Les chromatographes sont équipés de différentes colonnes et détecteurs pour l'analyse des composés hydrocarbonés de courte et longue chaîne carbonée et des composés oxygénés. Il existe également des colonnes qui permettent de doser l'hydrogène et l'oxygène en utilisant comme gaz vecteur de l'azote (car l'hélium a une conductivité thermique proche de l'hydrogène). Le tableau suivant résume les caractéristiques du matériel utilisé et les conditions opératoires.

Tableau 15. Conditions d'utilisation des différents chromatographes (Ristori 2000).

Chroma-tographe	Colonnes	Gaz vecteur	Programmation de température	Détecteur	Composés détectés
Varian 3300	CP-CarboPLOT P7 L = 25 m D_{int} = 0,53 mm D_f = 50 µm	N_2 15 mL.mn^{-1}	T=50°C t = 5 mn isotherme	TCD	H_2
Varian 3400	CP-Al_2O_3/KCl L = 50 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 5 µm	He 1,5 mL.mn^{-1}	T_i=70°C t_i=0 mn v=10°C/mn T_f=200°C t_f=20 mn	FID	HC<C7
Varian 3800	DB-5MS L = 50 m D_{int} = 0,25 mm D_f = 1 µm	He 1 mL.mn^{-1}	T_i=50°C t_i=5 mn v=10°C/mn T_f=150°C t_f=10 mn	FID + Saturn 2000 (MS)	Analyse en ligne HC + Oxygénés

Note : détecteur à thermistances noté TCD, détecteur à ionisation de flamme noté FID, spectromètre de masse noté MS

La spectrométrie de masse a également été employée pour des analyses qualitatives des produits intermédiaires d'oxydation. Le spectromètre associé au chromatographe VARIAN 3800- DB-5MS a été utilisé dans des conditions de ionisation standard (E = 70eV). Une fois les spectres acquis, ils ont été comparés avec ceux d'une base de données (NIST 98) ou avec des spectres acquis après injection de composés.

La spectroscopie infrarouge est une technique basée sur l'absorption d'un rayonnement infrarouge par le composé analysé. Elle permet via la détection des vibrations/rotations caractéristiques des liaisons chimiques, d'identifier les fonctions chimiques présentes dans l'échantillon et ainsi, être employée pour l'identification de composés ou pour déterminer la composition d'un échantillon de nature connue. Pour ces analyses, des calibrations utilisant des mélanges de concentration connue ont été entreprises.

3.2 Méthodologie

Une fois les propriétés physico-chimiques du carburant déterminées (masse molaire moyenne, masse volumique et température d'ébullition), les débits d'oxygène, d'azote et de carburant peuvent être calculés pour une température, un temps de passage, une pression et une richesse imposés, comme le montre la Figure 33.

1	Vr (L)	0,033										
2	T (K)	293										
3	τ (ms)	1000		a×C10.3H18.4+14.9a×O2 = 10.3a×CO2+9.2a×H2O								
4	φ	1,00										
5	P(bar)	10										
6												
7				débits réactifs (L/h)			$cm^3.min^{-1}$	Affichage débitmètre (V)			HPLC	
8	Exp #	T (K)	Q_{tot} (L/h)	*N2 aux.*	*N2 pr.*	*O2*	*Carbu*	N2 aux.	N2 pr.	O2	Carbu	T(°C)
9								5850 TR 9101-00051 / 7	5850 TR 9101-00063 / 17	5850 E T10769/006 500 cc/min		
10												
11												
12	1	560	*621,6*	*100,00*	*511,70*	*9,26*	*0,07663*	1,464	1,927	1,385	0,077	287
13	2	590	*590,0*	*100,00*	*480,59*	*8,79*	*0,07273*	1,464	1,804	1,315	0,073	317
14	3	620	*561,4*	*100,00*	*452,50*	*8,37*	*0,06922*	1,464	1,694	1,252	0,069	347
15	4	650	*535,5*	*100,00*	*427,00*	*7,98*	*0,06602*	1,464	1,594	1,194	0,066	377
16	5	680	*511,9*	*100,00*	*403,75*	*7,63*	*0,06311*	1,464	1,503	1,142	0,063	407
17	6	710	*490,3*	*100,00*	*382,46*	*7,30*	*0,06044*	1,464	1,419	1,094	0,060	437
18	7	740	*470,4*	*100,00*	*362,90*	*7,01*	*0,05799*	1,464	1,343	1,050	0,058	467
19	8	770	*452,1*	*100,00*	*344,87*	*6,74*	*0,05573*	1,464	1,273	1,009	0,056	497
20	9	800	*435,1*	*100,00*	*328,19*	*6,48*	*0,05364*	1,464	1,207	0,972	0,054	527
21	10	835	*416,9*	*100,00*	*310,24*	*6,21*	*0,05139*	1,464	1,138	0,931	0,051	562
22	11	870	*400,1*	*100,00*	*293,74*	*5,96*	*0,04933*	1,464	1,073	0,894	0,049	597
23	12	905	*384,6*	*100,00*	*278,51*	*5,73*	*0,04742*	1,464	1,014	0,860	0,047	632
24	13	945	*368,3*	*100,00*	*262,49*	*5,49*	*0,04541*	1,464	0,952	0,824	0,045	672
25	14	985	*353,4*	*100,00*	*247,77*	*5,27*	*0,04357*	1,464	0,895	0,791	0,044	712
26	15	1030	*337,9*	*100,00*	*232,57*	*5,04*	*0,04166*	1,464	0,836	0,756	0,042	757
27	16	1075	*323,8*	*100,00*	*218,65*	*4,82*	*0,03992*	1,464	0,782	0,725	0,040	802
28	17	1120	*310,8*	*100,00*	*205,85*	*4,63*	*0,03832*	1,464	0,733	0,696	0,038	847

etal O2(300cc) / etal O2 (500cc) / Etal O2(3L) / fuel phi=1 / fuel phi=1 O2 500C / fuel phi=1.5 / fuel phi=1

Figure 33. Feuille de calcul Excel des débits d'azote, d'oxygène et de carburant, pour un mélange stœchiométrique de carburant modèle type gazole à 10 bar.

Lorsque le JSR arrive à la température imposée, en travaillant à débit constant, il est nécessaire d'attendre entre 20 et 30 minutes avant le prélèvement. Ce temps d'attente garantie l'établissement des conditions opératoires souhaitées au sein du réacteur.

Dû à la faible pression de vapeur saturante du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène, les composés primaires des carburants modèles ont été analysés en ligne, tandis que les produits ont été analysés en parallèle. Apres détermination des concentrations des espèces (par FTIR, GC-MS/FID/TCD), on considère que l'expérience est valide si la concentration des espèces communes dans les différents spectres présente une bonne répétabilité des mesures et un bilan carbone raisonnablement bon (100 ±10%).

Ainsi, chaque expérience permettra d'ajouter un point dans l'évolution de la concentration des espèces en fonction de la température (Figure 34). Sur cette figure on observe également le régime de température à flamme froide, le coefficient négatif de température (CNT) et le régime d'oxydation de hautes températures.

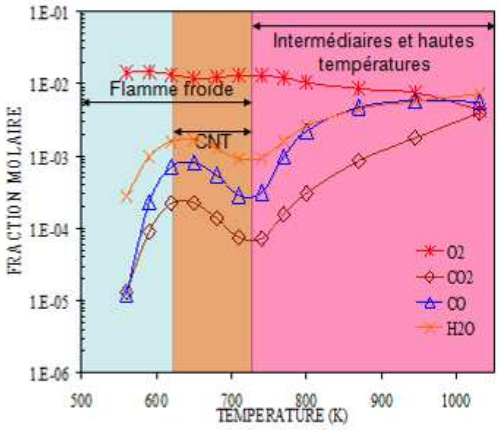


Figure 34. Evolution de la formation des espèces en fonction de la température lors de l'oxydation du carburant modèle de type gazole (70% de *n*-décane+30% 1-méthylnaphtalène).

Les expériences réalisées avec ce dispositif ont permis de suivre l'évolution de la concentration des espèces dans un intervalle de température allant de 560 à 1030K, depuis le début de l'oxydation jusqu'à l'apparition d'une concentration de CO_2 supérieure à celle de CO en milieu pauvre et stœchiométrique. Ces expériences ont été réalisées avec deux carburants réels (gazole et B30), ainsi que pour les carburants modèles représentatifs du gazole (70%$_{mol}$ de *n*-décane et 30%$_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène) et du B30 (49%$_{mol}$ de *n*-décane, 21% $_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène et 30%$_{mol}$ méthyle octanoate).

Les profils de concentrations d'espèces ont été mesurés pour trois richesses (0,25 ; 1,0 et 1,5) et pour deux pressions 6 et 10 bar, comme il sera montré dans la suite de ce chapitre.

3.3 Résultats expérimentaux

Dans cette étude, l'oxydation des carburants réels (gazoles, B10, B30) et des carburant modèle de type gazole et B30, a été réalisée avec l'objectif de mieux comprendre l'effet de la fraction des composés oxygénés dans les nouveaux carburants. Cette étude en JSR a été menée dans un large domaine de température. Les carburants sans additifs utilisés ont été fournis par Elf-TOTAL. Ils sont composés d'un gazole commercial à faible teneur en soufre (86,4% en masse de C, 13,5% en mase de H, avec S <6 ppm), un B10 réel (85,7% en masse de C, 13,2% en masse d'atomes d'hydrogène et 1,1 en masse de O, avec S <6 ppm) et un B30 réel (84,1% en masse de C, 12,9% en masse d'atomes d'hydrogène et 3,0 en masse de O, avec S <6 ppm). De plus, pour les carburants modèles, des hydrocarbures de haute pureté fournis par Sigma-Aldrich ont été utilisés : *n*-décane (> 99% pur), 1-méthylnaphtalène (> 95% pur) et octanoate de méthyle (99%). Le Tableau 16 résume des conditions expérimentales utilisées.

Tableau 16. Conditions expérimentales étudiées en JSR.

Carburant	***Fraction molaires (ppm)***				***T (K)***	***φ***	***τ (s)***	***P (bar)***
	$C_{10}H_{22}$	$C_{11}H_{10}$	$C_9H_{18}O_2$	*Carburant*				
Gazole $C_{15,64}H_{29,34}$		–		650	560-1030	0,25 - 1,5	1 et 0,6	10
B30 $C_{16,47}H_{30,83}O_{0,51}$		–		600	560-1030	0,25 - 1	1 et 0,6	10
Gazole Modèle $C_{10,3}H_{18,4}$	700	300	0	1000	560-1030	0,25-1,5	1 et 0,6	10 et 6
B30 Modèle $C_{9,91}H_{18,28}O_{0,6}$	490	210	300	1000	560-1030	0,25-1,5	1 et 0,6	10 et 6

3.3.1 Oxydation du gazole commercial

a) Conditions expérimentales

L'oxydation du gazole commercial a été réalisée à un temps de passage moyen constant (1 s), à haute pression, dans un large domaine de température (560 à 1030K) et de richesse (cf. tableau ci-dessous).

Tableau 17. Conditions expérimentales de l'oxydation du gazole en réacteur auto-agité.

Fractions molaires (ppm)				
Gazole	O_2	N_2	***φ***	***P (bar)***
650	0,0597	0,9396	0,25	10
650	0,0299	0,9695	0,5	10
650	0,0149	0,9844	1	10
650	0,0100	0,9894	1,5	10

Les caractéristiques physico-chimiques du gazole commercial utilisé lors de ces expériences sont résumées par le tableau suivant.

Tableau 18. Caractéristiques physico-chimiques du gazole Elf-TOTAL sans additifs

Propriétés	***Gazole*** $C_{15,64}H_{29,34}$
H/C	1,87
M.V. (kg/m^3)	834
Viscosité (mm^2/s)	2,7 à 40°C
TLF France/Hiver (°C)	-15
PCI (MJ/kg)	42,9
Indice de cétane	53
Point éclair (55min)	65°C
Aromatiques Totaux	22,1% masse
S (ppm)	6

b) Résultats expérimentaux

Lors de l'oxydation du gazole à 10 bar, on a suivi l'évolution des concentrations d'espèces en fonction de la température pour trois richesses. Ces résultats sont représentés sur les Figure 35 (richesse 0.25), Figure 36 (richesse 0,5), Figure 37 (richesse 1) et Figure 38 (richesse 1,5).

En général pour toutes les richesses, l'étude expérimentale montre un coefficient négatif de température (NTC) bien défini entre 650 et 750K qui se caractérise par une baisse de la réactivité globale (réduction de la formation de produits et de la consommation des réactifs).

Parmi les espèces intermédiaires détectées, le CO, le méthane, l'éthylène, l'hydrogène, le propène et le formaldéhyde sont majoritaires. Comme mentionné par Diévart 2008 dans ses travaux de thèse, la quantité produite d'alcènes est inversement proportionnelle à la taille de leur chaîne carbonée. Ceci a tété vérifié ici. On a remarqué le même comportement pour les aldéhydes et cétones détectées lors de ces travaux. On peut observer également de façon générale sur les profils d'espèces intermédiaires détectés que l'évolution de leur réactivité évolue selon une courbe en cloche avec une dépression dans la zone de la NTC et un maximum entre 800 et 900K où le régime d'oxydation de haute température commence.

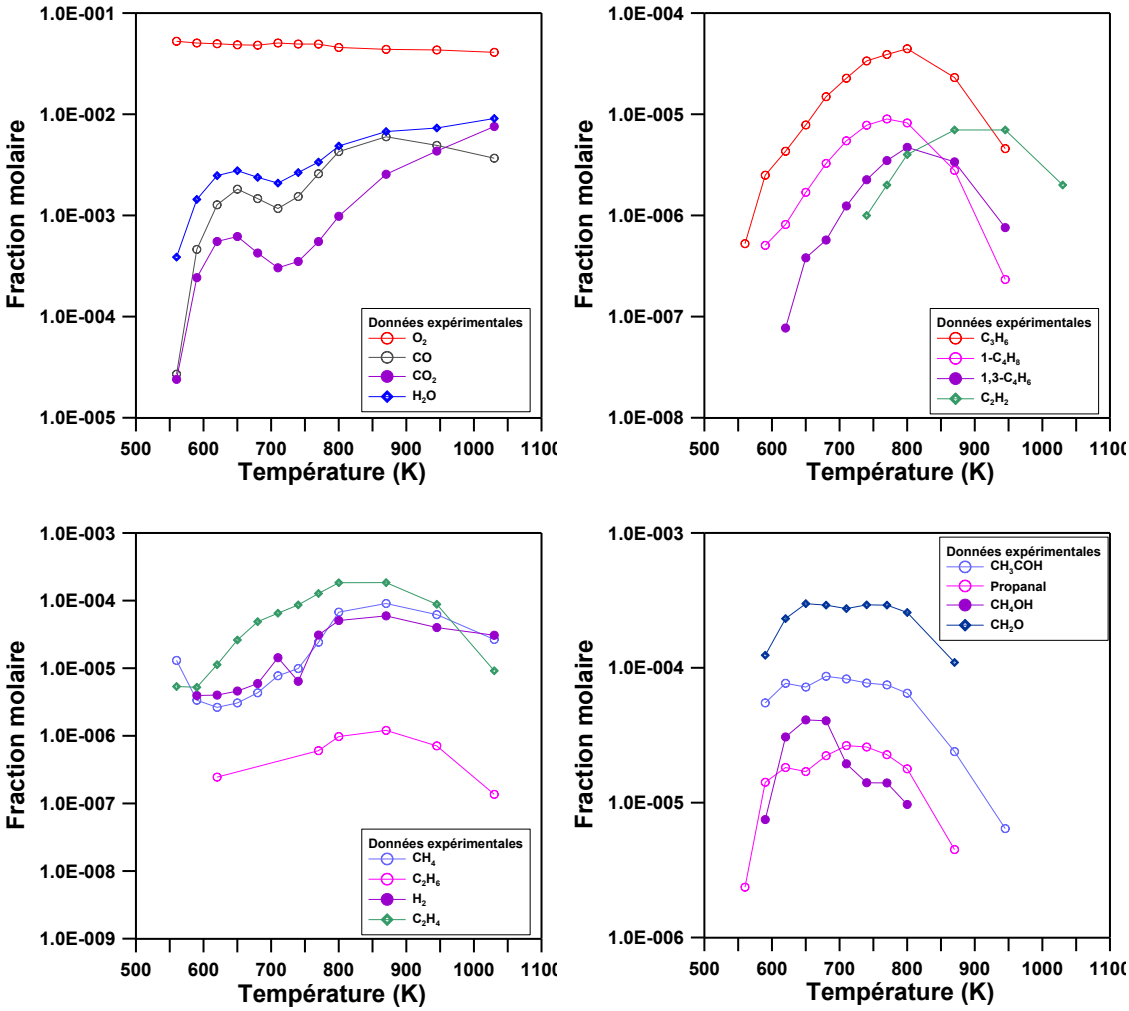


Figure 35. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

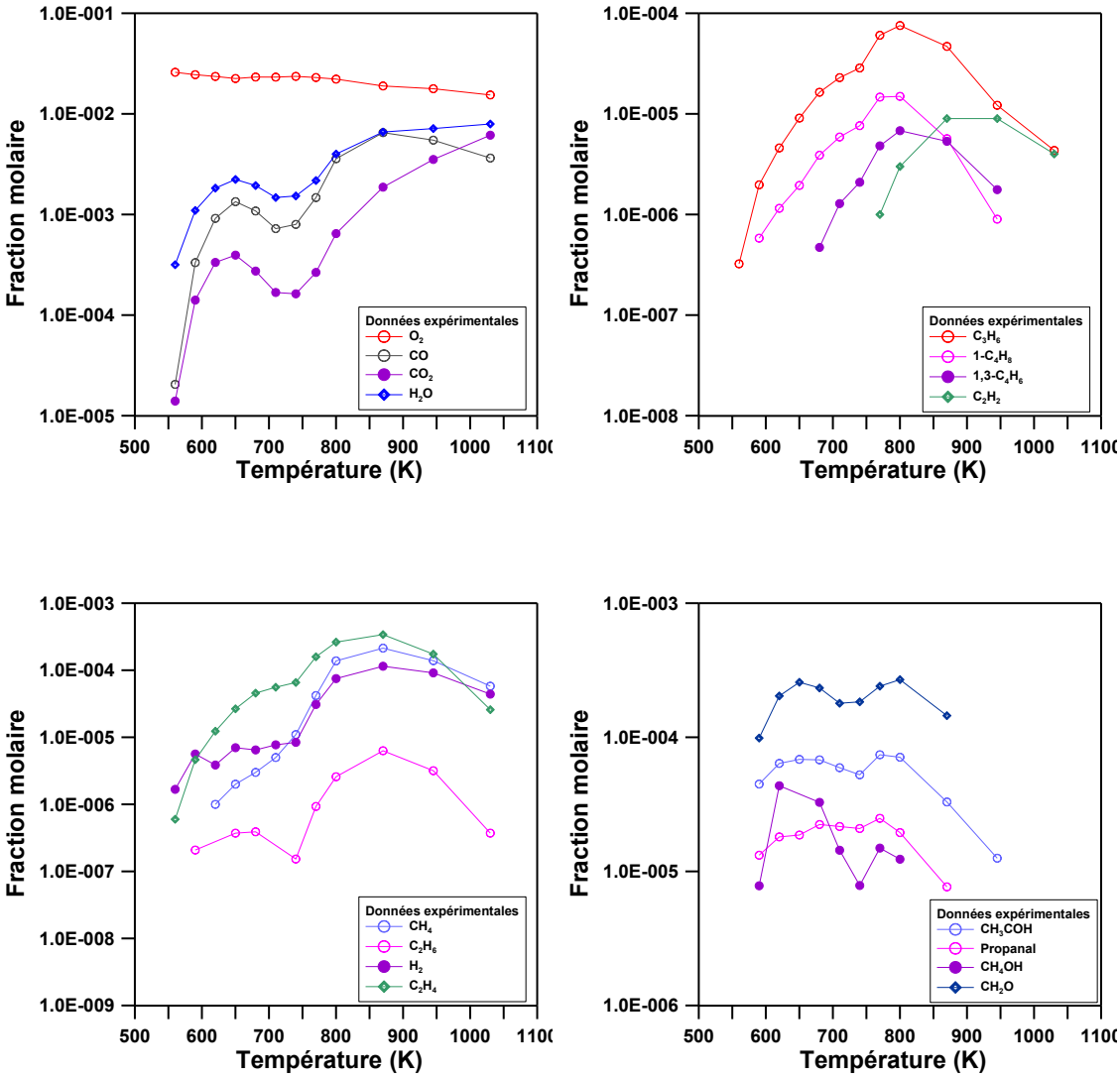


Figure 36. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

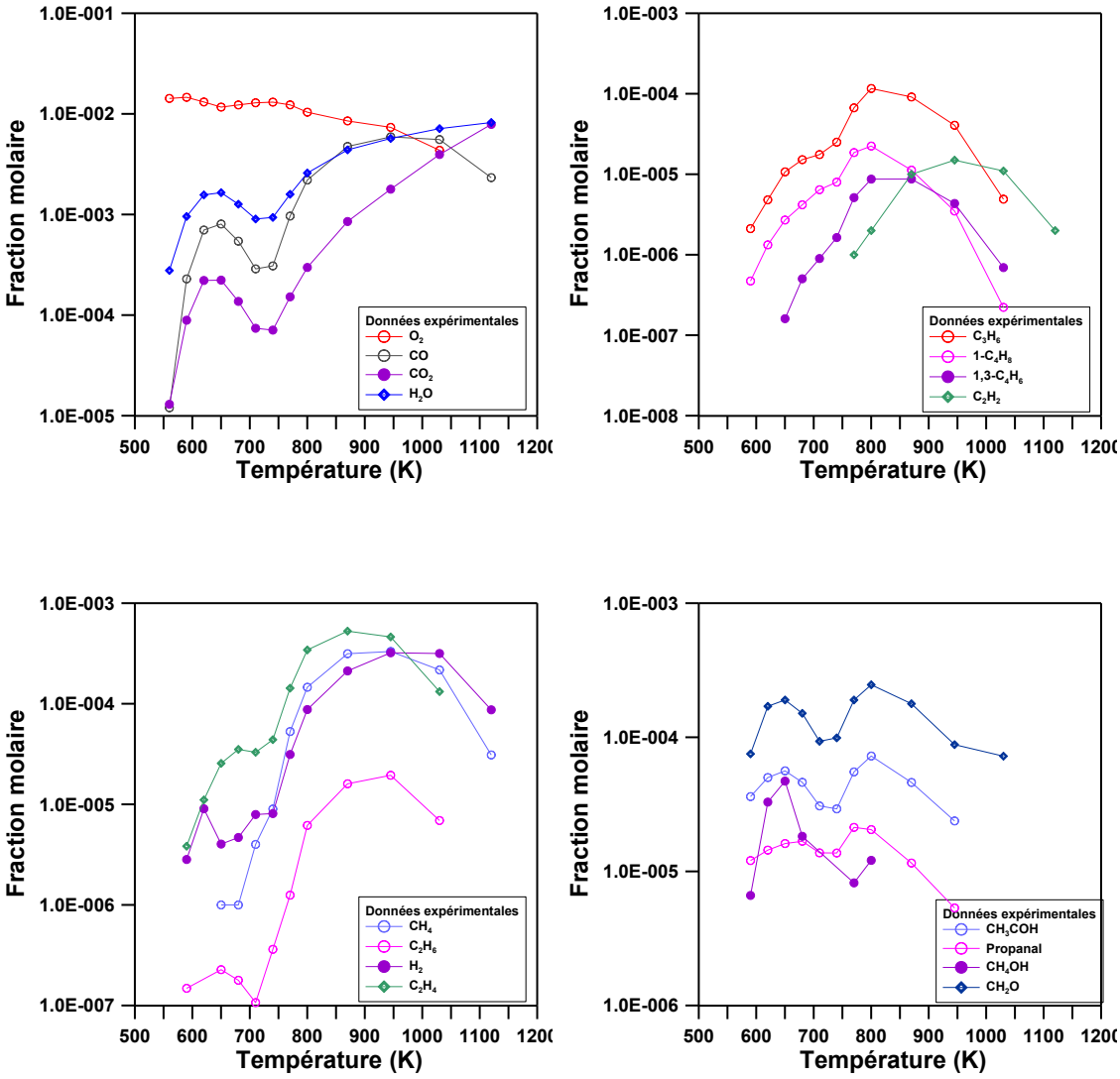


Figure 37. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

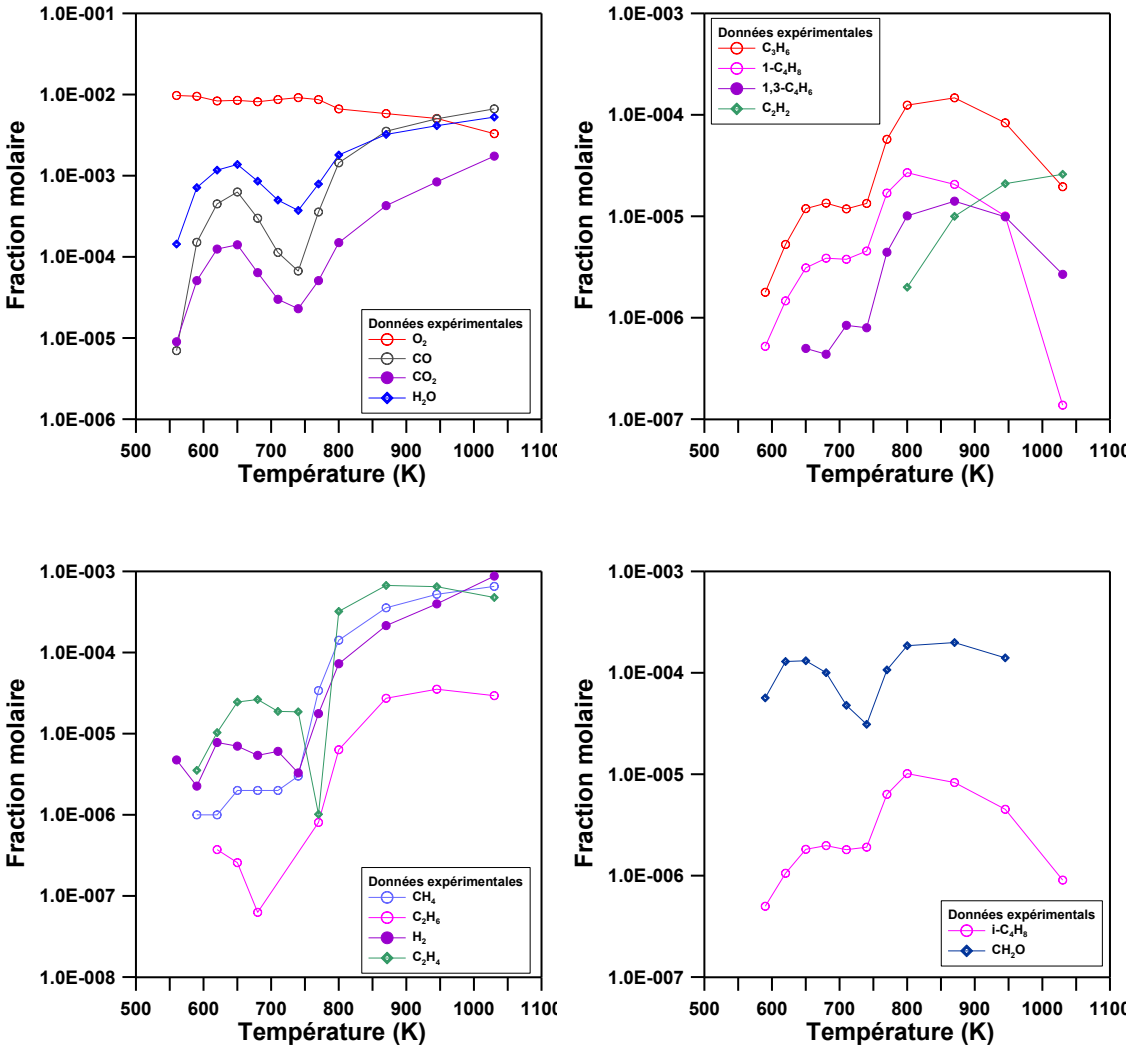


Figure 38. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.3.2Oxydation du B30 réel

a) Conditions expérimentales

Les expériences d'oxydation du B30 réel avec faible teneur en soufre ont été réalisées à haute pression, entre 560 et1030K, et à quatre richesses, comme l'indique le Tableau 19 ci-dessous :

Tableau 19. Conditions expérimentales de l'oxydation du B30 en réacteur auto-agité.

Fractions molaires (ppm)				
B30	***O_2***	***N_2***	***φ***	***P (bar)***
600	0,0574	0,9420	0,25	10
600	0,0287	0,9707	0,5	10
600	0,0144	0,9850	1	10
600	0,0096	0,9898	1,5	10

Les caractéristiques physico-chimiques du B30 réel utilisé lors de ces expériences peuvent sont résumées par le Tableau 20 ci-dessous.

Tableau 20. Caractéristiques physico-chimiques du B30 Elf-TOTAL sans additifs

Propriétés	***B30*** $C_{10,3}H_{18,4}O_{0,6}$
H/C	1,87
M.V. (kg/m^3)	846
Viscosité (mm^2/s)	3,01 à 40°C
TLF France/Hiver (°C)	-15
PCI (MJ/kg)	40.3
Indice de cétane	54,8
Point éclair (55min)	63°C
Teneur en esters méthyliques	29% v/v
S (ppm)	6

b) Résultats expérimentaux

Les profils de concentration de toutes les espèces mesurées lors de l'oxydation du B30 commercial pour les quatre richesses sont présentés sur la Figure 39 pour une richesse de 0,25 ; la Figure 40 pour une richesse de 0,5 ; la Figure 41 pour une richesse de 1 et, enfin, la Figure 42 pour une richesse de 1,5.

Comme pour le cas précédent, l'étude expérimentale montre un coefficient négatif de température (NTC) entre 650 et 750K.

Dans ce cas, parmi les espèces intermédiaires détectées, CO, le méthane, l'éthylène, le propène et le formaldéhyde sont majoritaires. Comme pour le gazole conventionnel, les espèces identifiées et mesurées correspondent aux espèces inférieures à C_5. Les profils de concentration des espèces intermédiaires évoluent également en forme de cloche et présentent une zone de NTC et un maximum entre 800 et 900K.

La richesse du carburant influence la vitesse de formation des produits. La Figure 39, la Figure 41 et la Figure 42 montrent que les concentrations sont plus importantes pour des mélanges combustibles pauvres en carburant et plus faibles pour des mélanges combustibles riches en carburant.

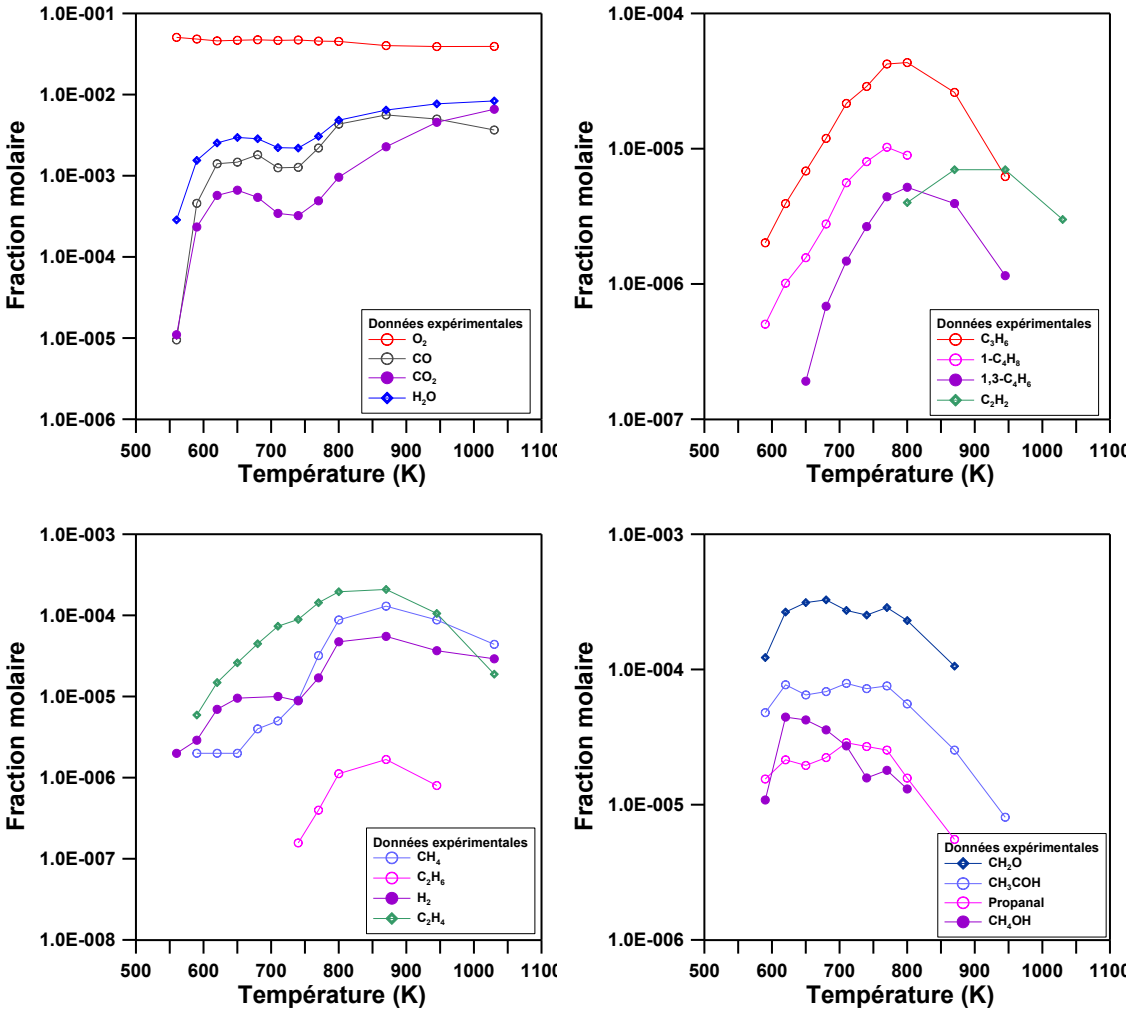


Figure 39. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

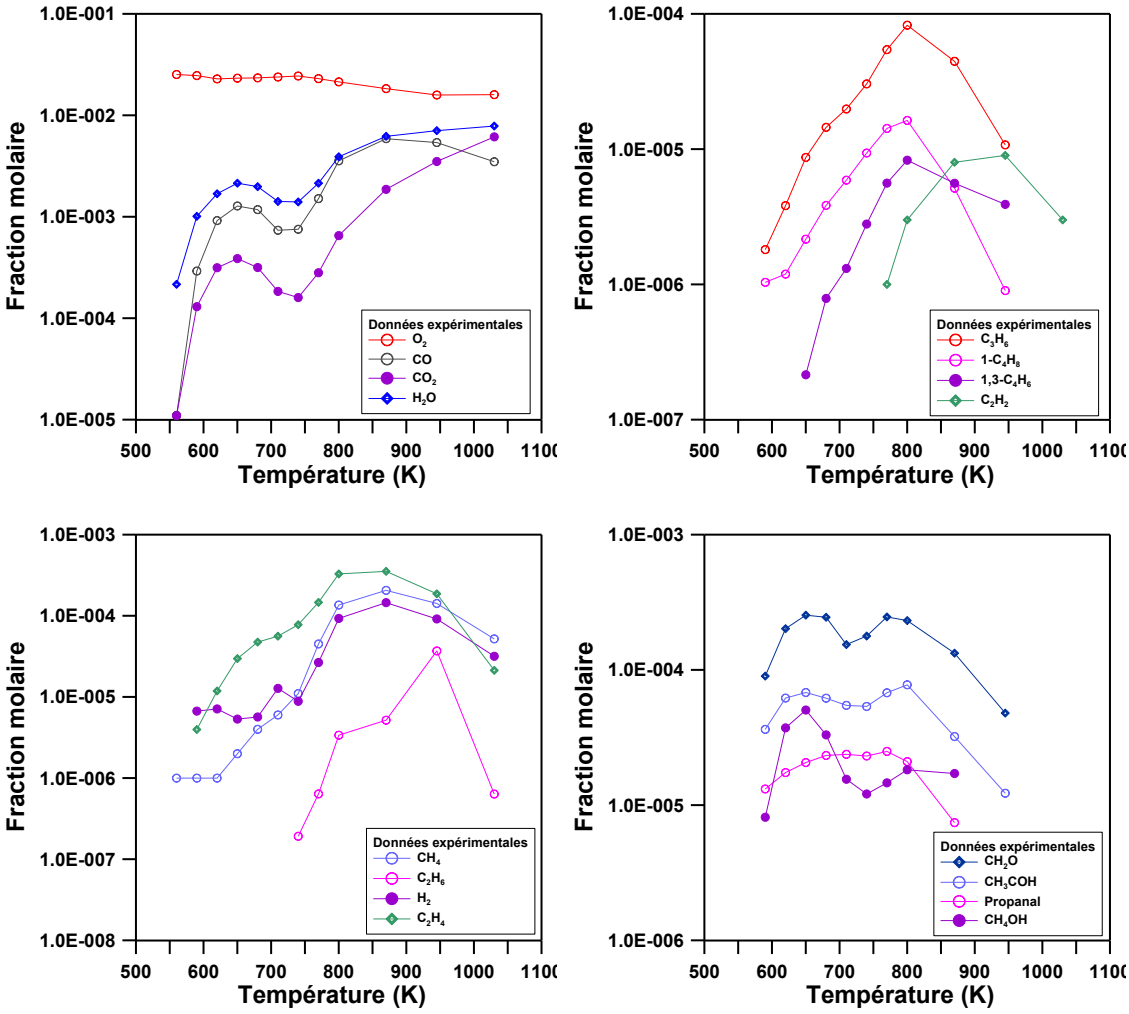


Figure 40. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

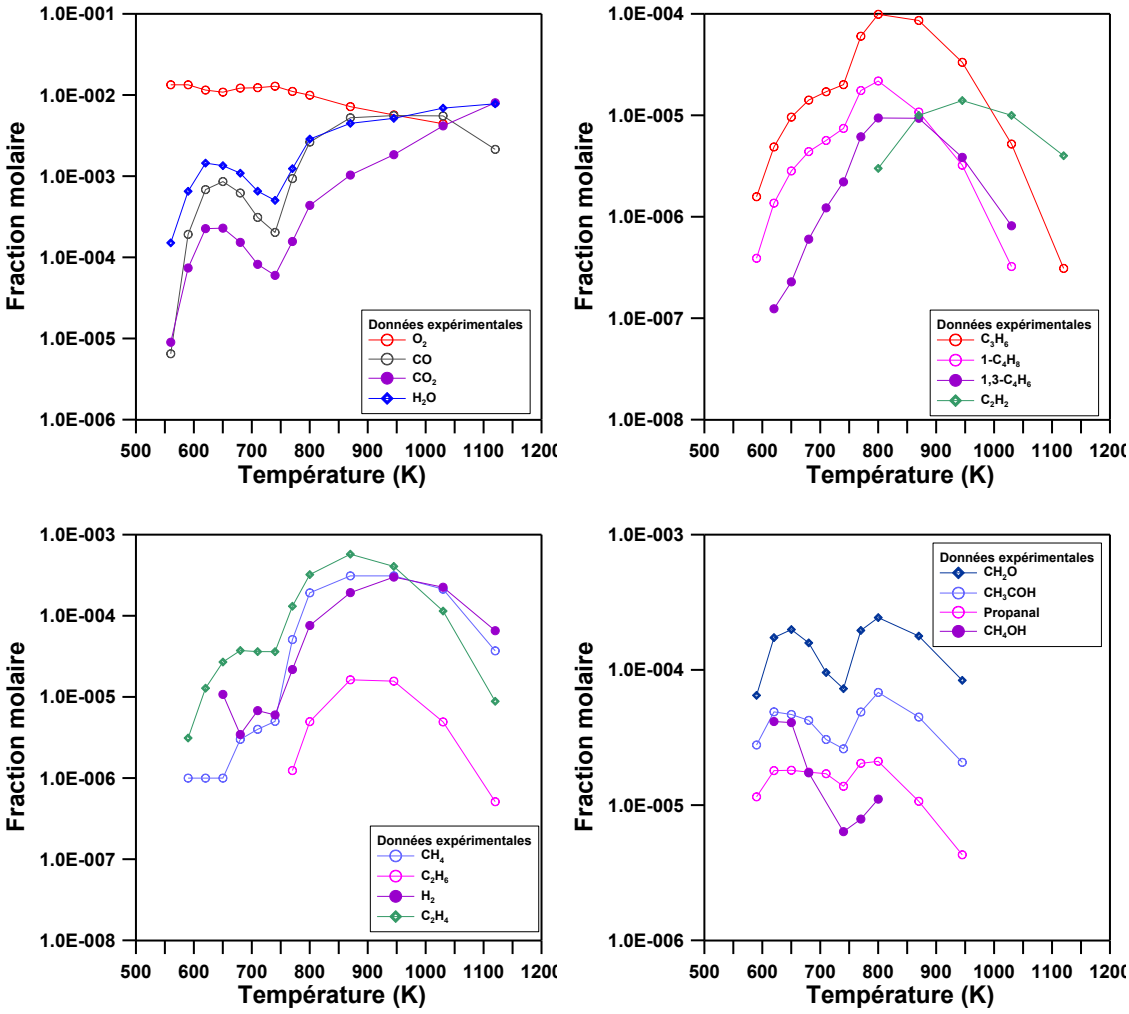


Figure 41. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06%

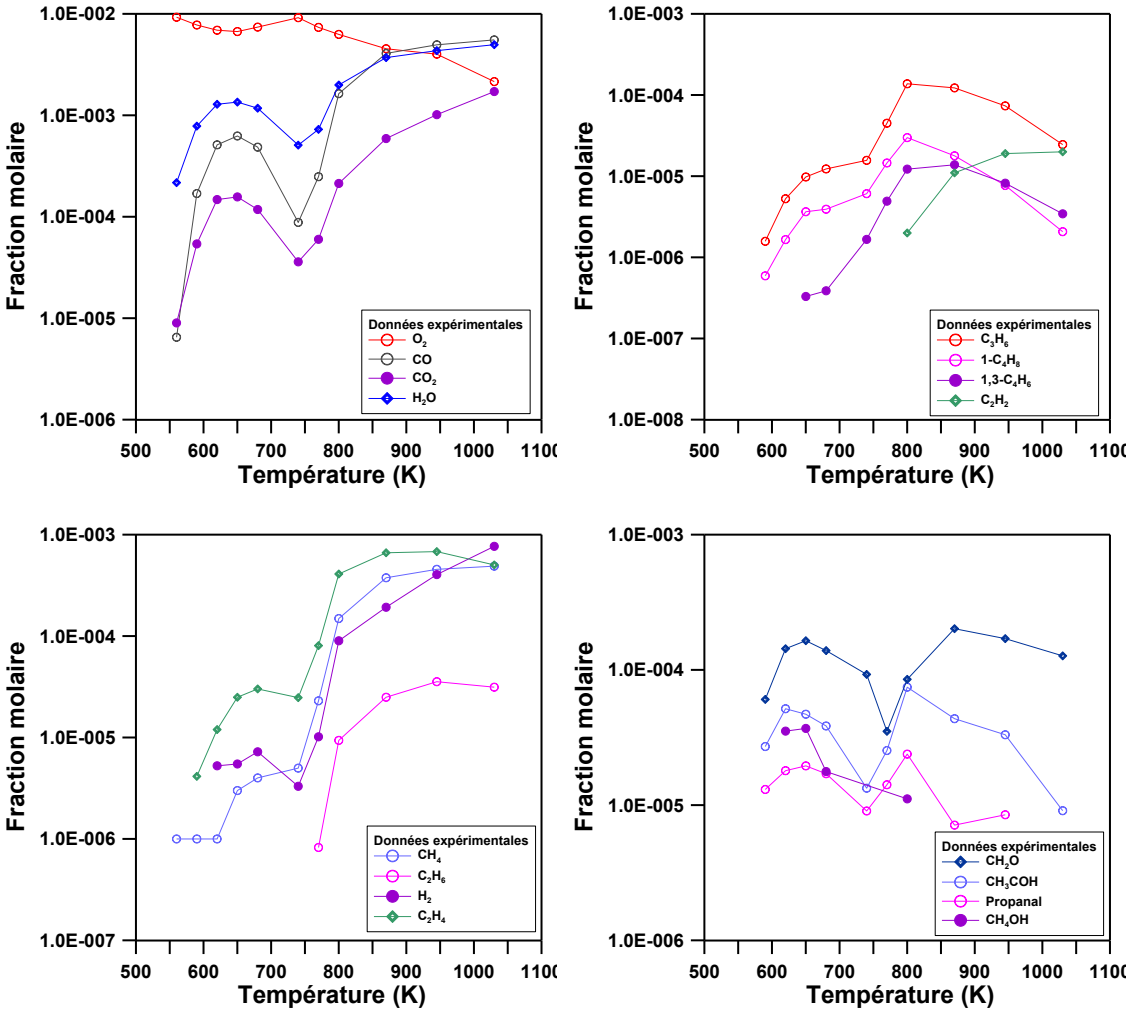


Figure 42. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.3.3 Oxydation du carburant modèle de type gazole (70%*n*-décane+30% 1-méthylnaphtalène)

a) Conditions expérimentales

Dans cette étude, l'oxydation du carburant modèle type gazole (ou IDEA-fuel) composé de 70%$_{mol}$ de *n*-décane (CAS 124-18-5, pureté> 99%, Aldrich) et de 30%$_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène (CAS 90-12-0, pureté > 95 %, Aldrich) a pour formule brute $C_{10,3}H_{18,4}$.

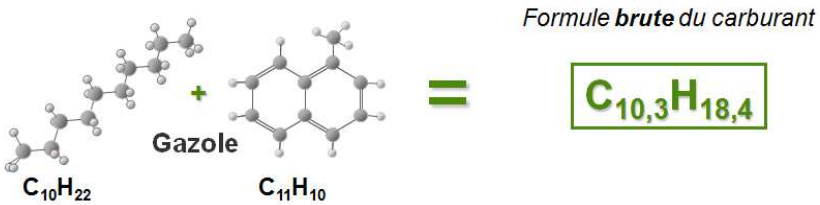


Figure 43. Composition du carburant modèle type gazole ou IDEA-fuel : 70% $_{mol}$ de *n*-décane et 30%$_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène.

Comme pour les cas précédents, les expériences ont été réalisées pour un domaine de températures allant de 560 à 1030K. Le temps de passage moyen a été gardé constant et égal à 0,6 s à 6 bar et 1 s à 10 bar. Plus de précisions sur les conditions expérimentales sont indiquées dans le Tableau 21 ci-dessous.

Tableau 21. Conditions expérimentales de l'oxydation du carburant modèle type gazole en réacteur auto-agité.

Fractions molaires (ppm)					
***n*-décane**	***1*-Méthylnaphtalène**	O_2	N_2	φ	***P* (bar)**
700	300	0,0596	0,9394	0,25	10
700	300	0,0298	0,9692	0,5	6 et 10
700	300	0,0149	0,9841	1	6 et 10
700	300	0,0099	0,9891	1,5	10

Les caractéristiques physico-chimiques du carburant modèle de type gazole mesurées sont résumées dans le Tableau 22 .

Tableau 22. Quelques caractéristiques physico-chimiques du carburant modèle de type gazole.

Propriétés	***Gazole modèle*** $C_{10,3}H_{18,4}$
H/C	1,8
M.V. (kg/m^3)	798
PCI (MJ/kg)	≤ 44,240*
Indice de cétane	55
Point éclair (55min)	≥60°C*
Aromatiques Totaux	30% Mole
S (ppm)	≃0

*Propriétés du *n*-décane (les propriétés correspondantes du carburant modèle n'ont pas été mesurées dans ces travaux).

b) Résultats expérimentaux

Dans cet intervalle de températures, les trois régimes d'oxydation peuvent être observés pour les deux pressions de travail (6 et 10 bar) : la flamme froide entre 560 et 700K, le coefficient négatif de température entre 700 et 900K, et le régime d'oxydation de haute température à T>900K. Ces résultats sont représentés sur la Figure 44 (richesse 0.25), la Figure 45 (richesse 0,5), la Figure 46 (richesse 1) et la Figure 47 (richesse 1,5), à une pression de 10 bar, et sur la Figure 48 (richesse 0,5) et la Figure 49 (richesse 1) à une pression de 6 bar.

Au cours de cette étude (à 6 et 10 bar) on a suivi la consommation du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène, ainsi que la formation des espèces intermédiaires majoritaires telles que l'hydrogène, le CO, le méthane, l'éthylène, le propène, le butène, le 1-pentène et le formaldéhyde. On peut observer également de façon générale sur les profils d'espèces intermédiaires détectées que l'évolution de leur concentration évolue selon une courbe en cloche avec une dépression dans la zone de NTC et un maximum entre 800 et 900K, où le régime d'oxydation de haute température commence.

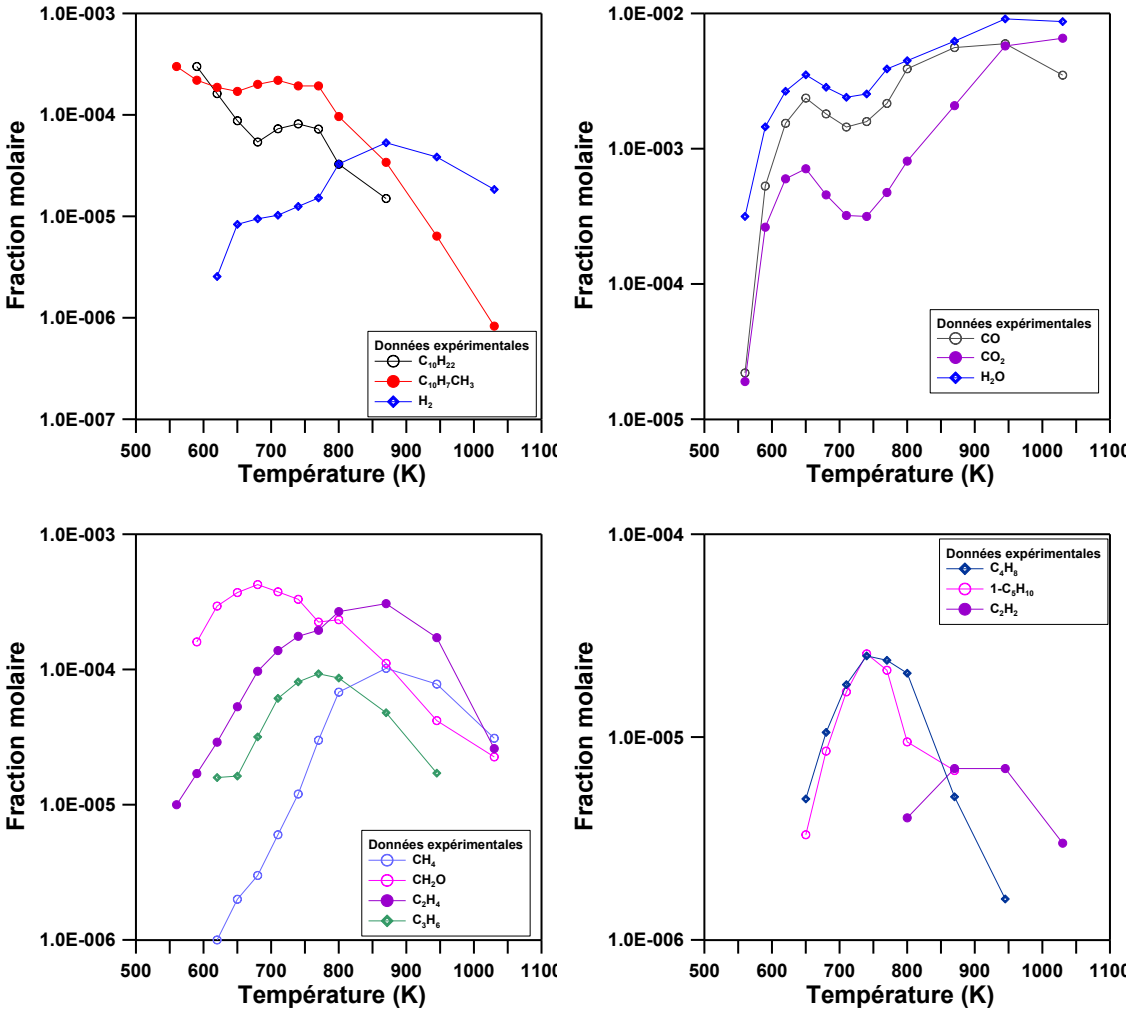


Figure 44. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

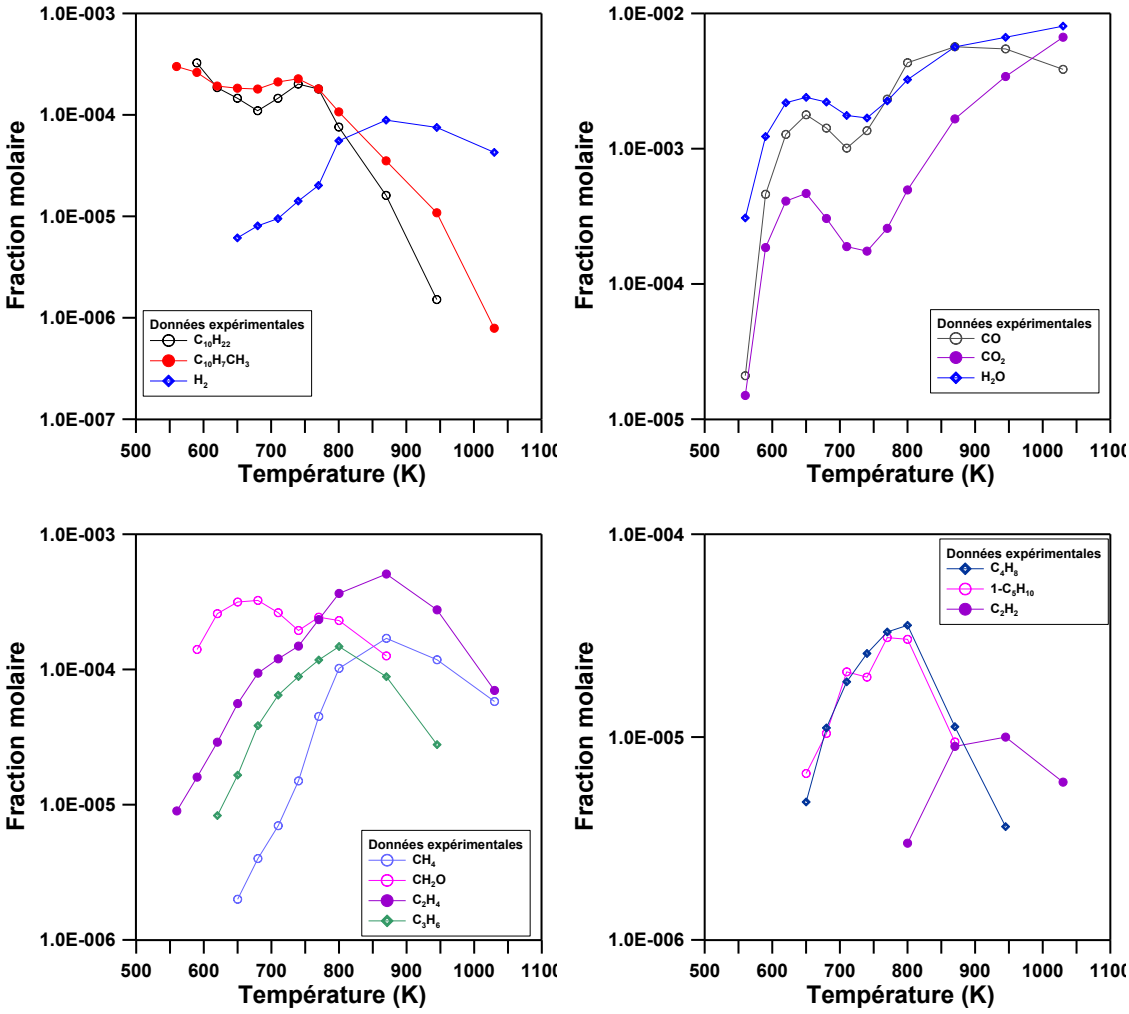


Figure 45. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

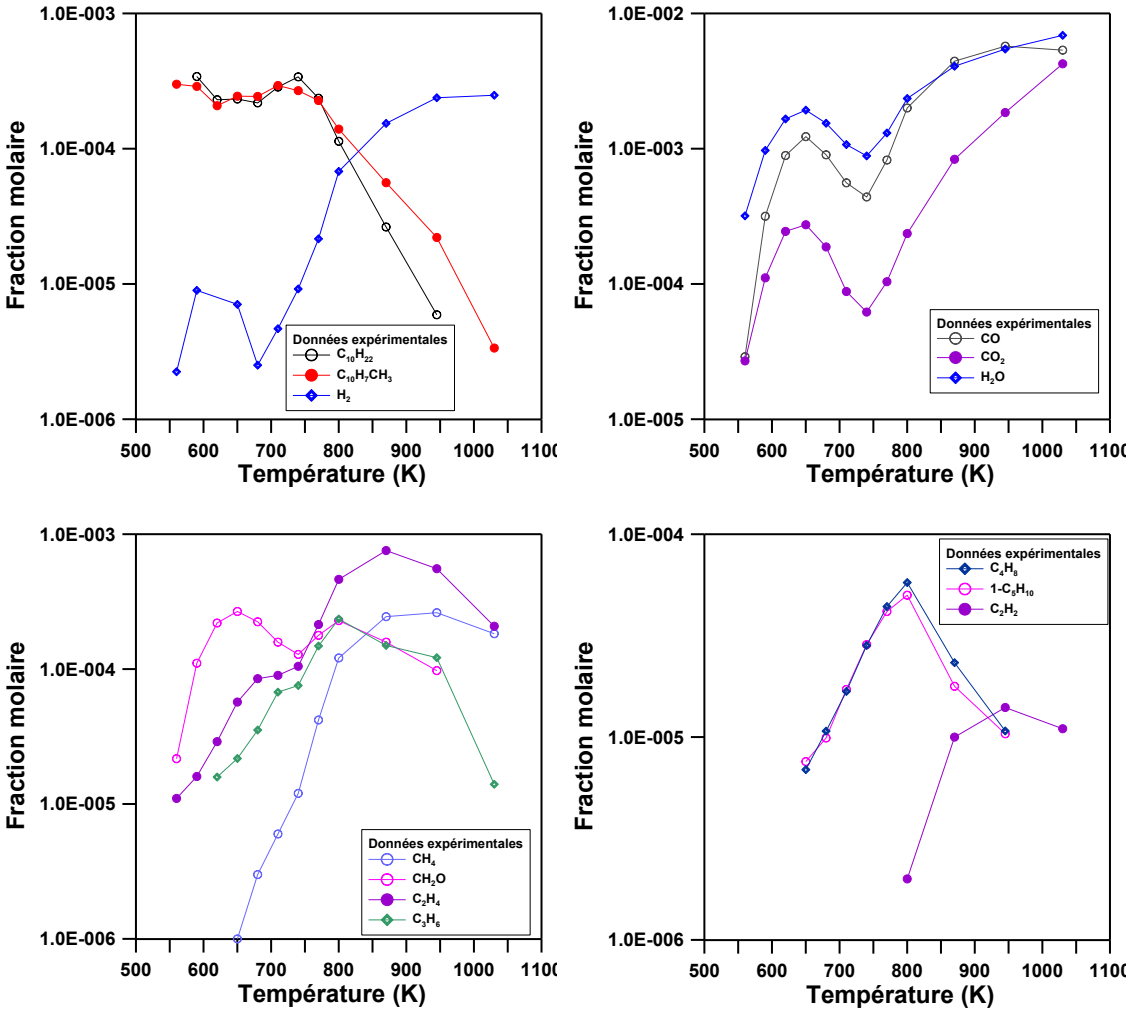


Figure 46. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

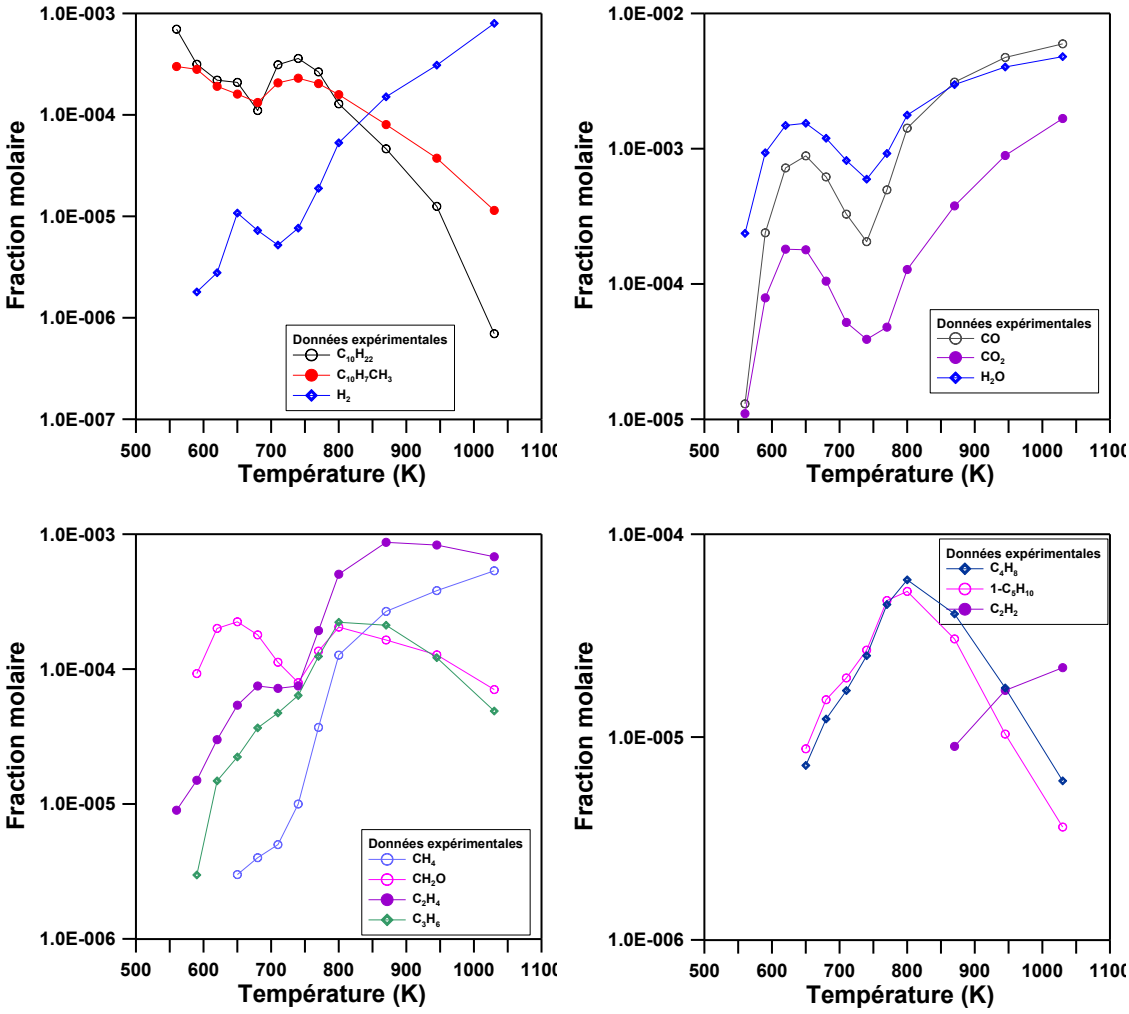


Figure 47. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%

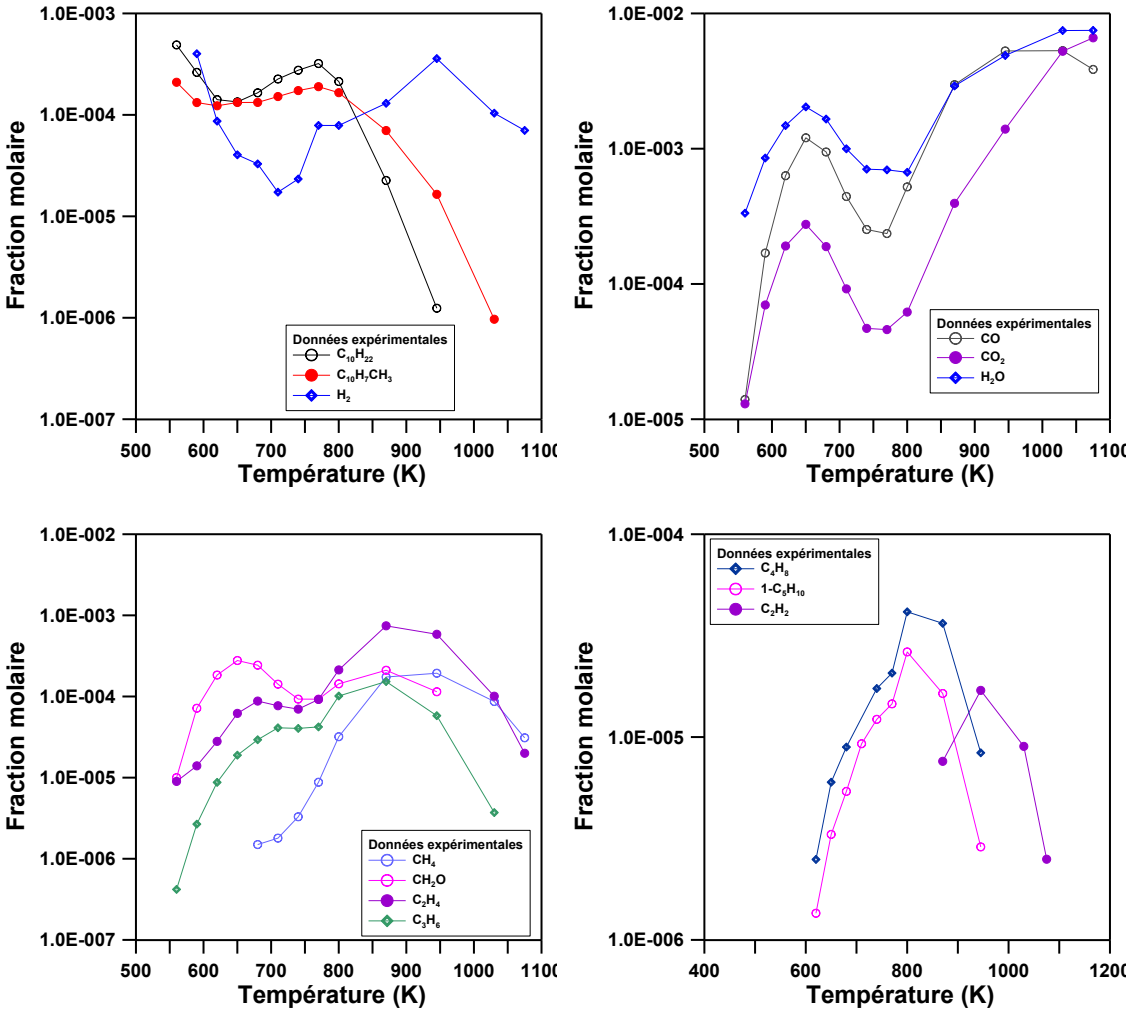


Figure 48. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=6 bar ; φ=0,5 ; τ=0.6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

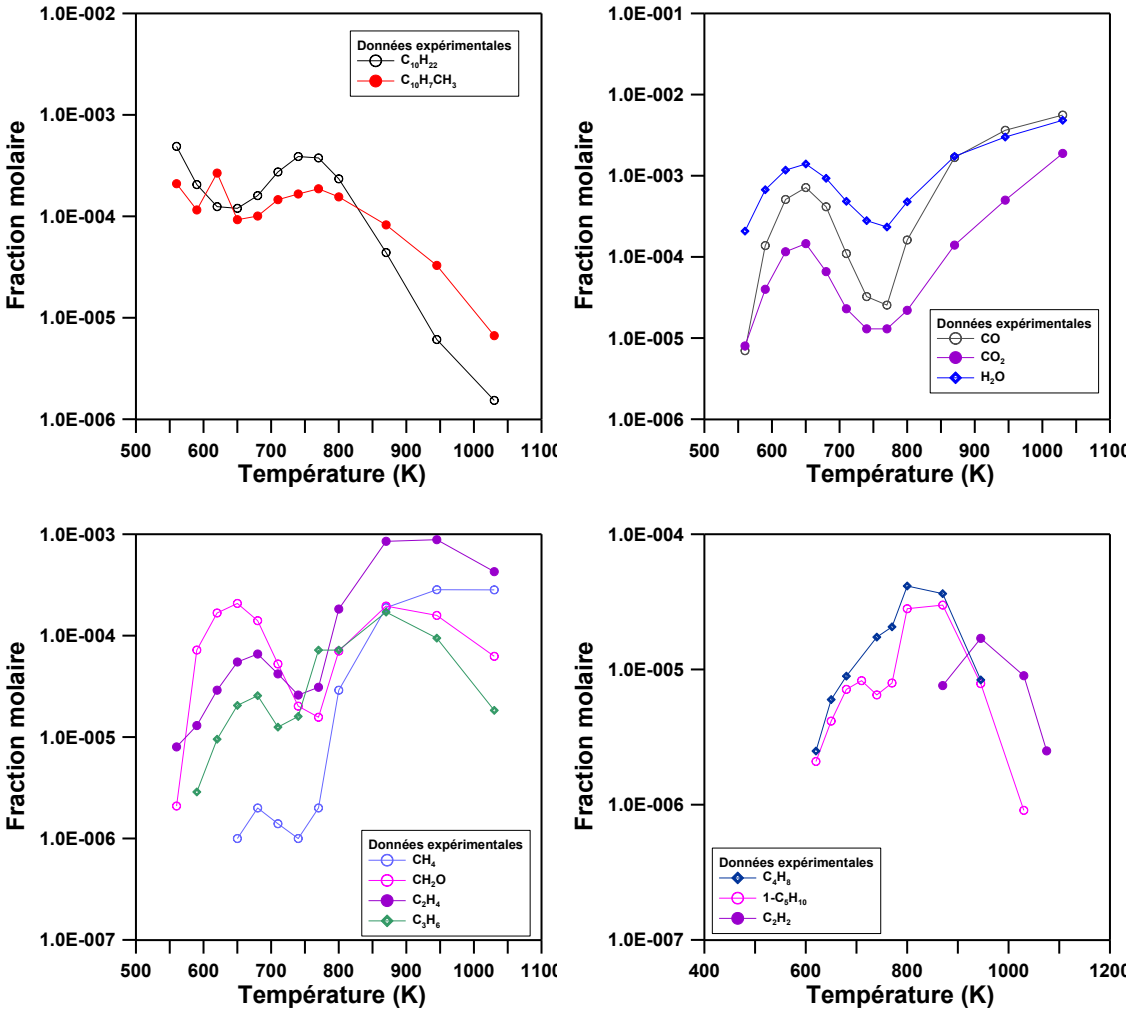


Figure 49. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=6 bar ; φ=1,0 ; τ=0.6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.3.4 Oxydation du carburant modèle de type B30 (49%*n*-décane / 21% 1-méthylnaphtalène / 30% octanoate de méthyle)

a) Conditions expérimentales

Dans cette section, l'oxydation du carburant modèle de type B30 composé de 49%$_{mol}$ de *n*-décane (CAS 124-18-5, pureté > 99%, Aldrich), de 21 %$_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène (CAS 90-12-0, pureté > 95 %, Aldrich) et de 30%$_{mol}$ d'octanoate de méthyle (CAS 111-11-5, pureté >99%) a été menée. Ce carburant a pour formule brute $C_{9,913}H_{18,28}O_{0,6}$.

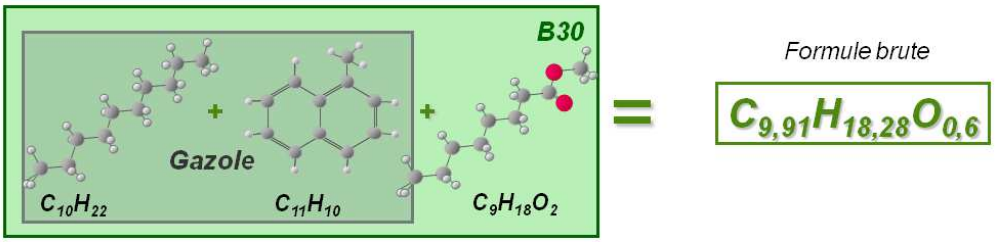


Figure 50. Composition du carburant modèle type B30 : 49% $_{mol}$ de *n*-décane, 21% $_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène et 30% $_{mol}$ d'octanoate de méthyle.

Dans ces expériences, la température a aussi été variée par étapes dans la gamme 560-1030K, en gardant le temps de passage moyen constant et égal à 0,6 s à 6 bar, et à 1 s à 10 bar comme indiqué dans le Tableau 23 ci-dessous.

Tableau 23. Conditions expérimentales de l'oxydation du carburant modèle type B30 en réacteur auto-agité.

Fractions molaires (ppm)						
***n*-décane**	***1*-Méthylnaphtalène**	***Octanoate de méthyle***	O_2	N_2	φ	***P* (bar)**
490	210	300	0,0567	0,9423	0,25	10
490	210	300	0,0284	0,9706	0,5	6 et 10
490	210	300	0,0142	0,9848	1	6 et 10
490	210	300	0,0095	0,9895	1,5	10

Les caractéristiques physico-chimiques du carburant modèle de type B30 mesurées sont résumées dans le Tableau 24 ci-dessous.

Tableau 24. Quelques caractéristiques physico-chimiques du carburant modèle type B30.

Propriétés	***B30 modèle*** $C_{9,91}H_{18,28}O_{0,6}$
H/C	1,84
M.V. (kg/m^3)	820
PCI (MJ/kg)	≤ 44,240
Indice de cétane	~ 48
Point éclair (55min)	≥60°C
Teneur en esters méthyliques d'acides	30% mol
Aromatiques Totaux	21% mol
S (ppm)	≈0

b) Résultats expérimentaux

Les expériences ont été réalisées pour plusieurs richesses comme dans les cas précédent. Les résultats sont présentés sur la Figure 51(φ= 0.25), la Figure 52 (φ= 0,5), la Figure 53 (φ= 1) et la Figure 54 (φ= 1,5), à une pression de 10 bar, et sur la Figure 55 (φ= 0,5) et la Figure 56 (φ =1) à une pression de 6 bar.

Comme pour le carburant modèle de type gazole, on a suivi la consommation des constituants du carburant modèle (*n*-décane, 1-méthylnaphtalène et octanoate de méthyle) pour toutes les richesses et toutes les pressions (6 et 10 bar). Plus de 20 espèces ont été identifiées et mesurées par FTIR, CG-MS/FID/TCD. Les profils de concentrations ont été obtenus pour H_2, H_2O, O_2, CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_6, C_2H_4, C_2H_2, C_3H_6, 1-C_4H_8, 1,3-C_4H_6 et 1-C_5H_{10}. D'autres espèces mineures détectées à des niveaux de l'ordre du ppm n'ont pas été quantifiées.

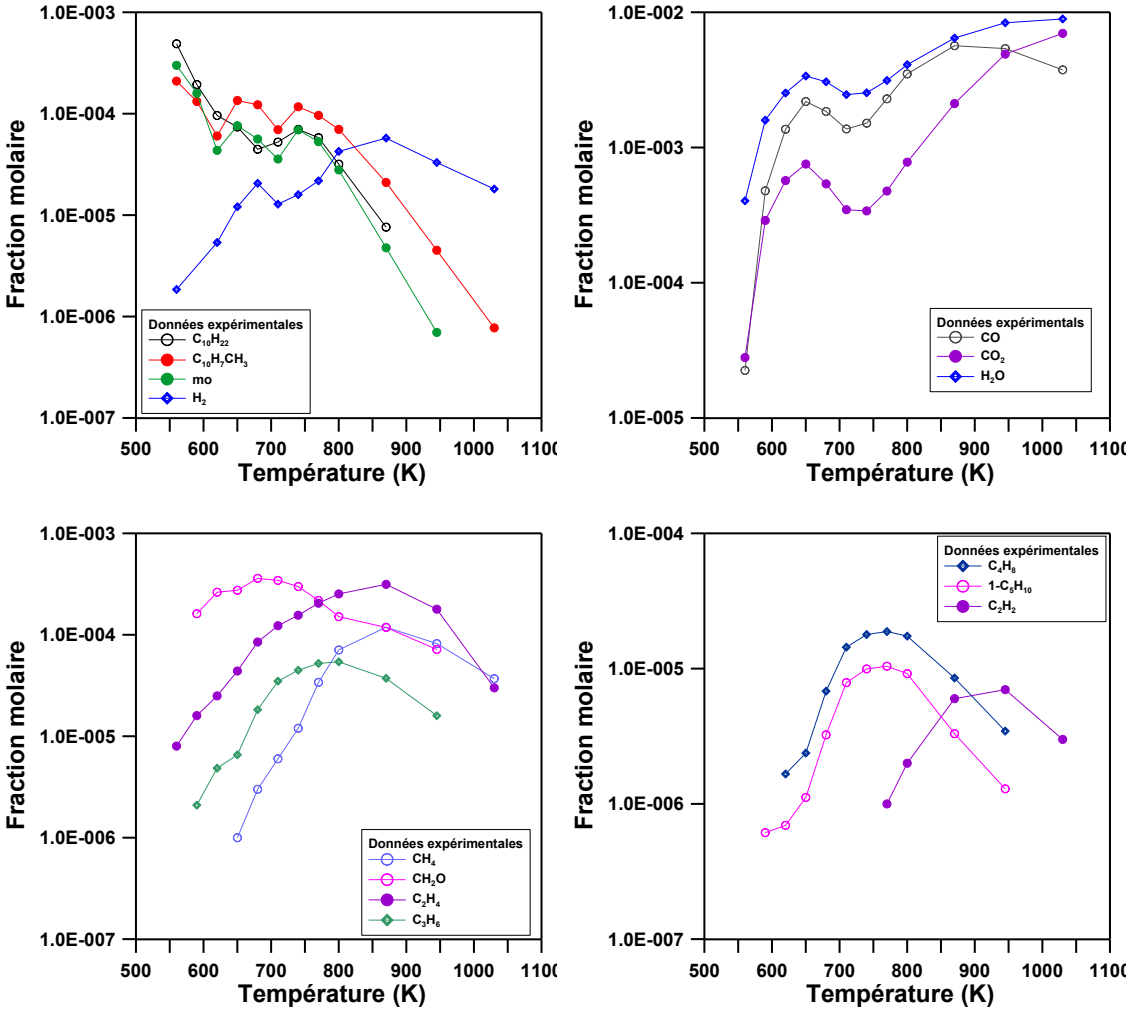


Figure 51. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

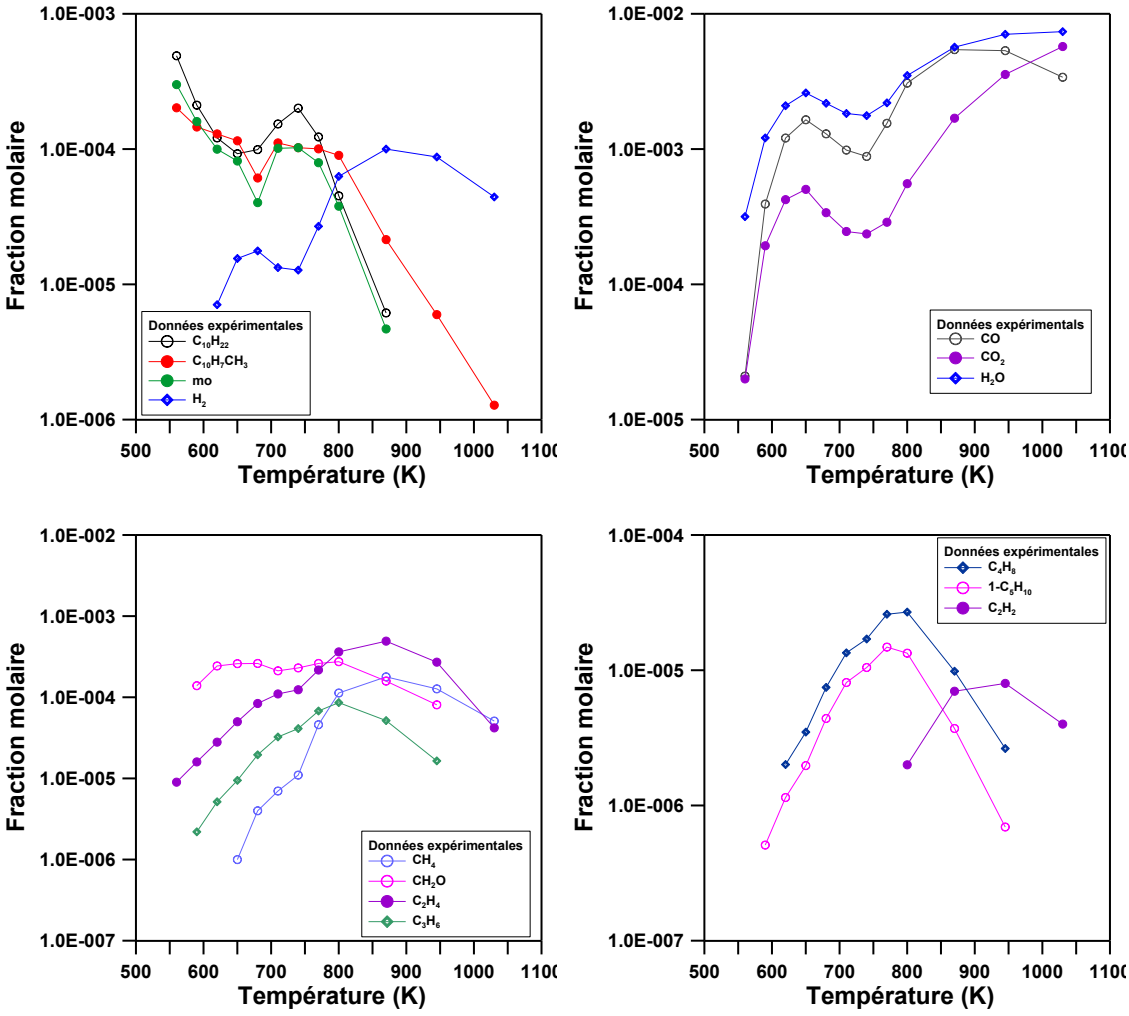


Figure 52. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

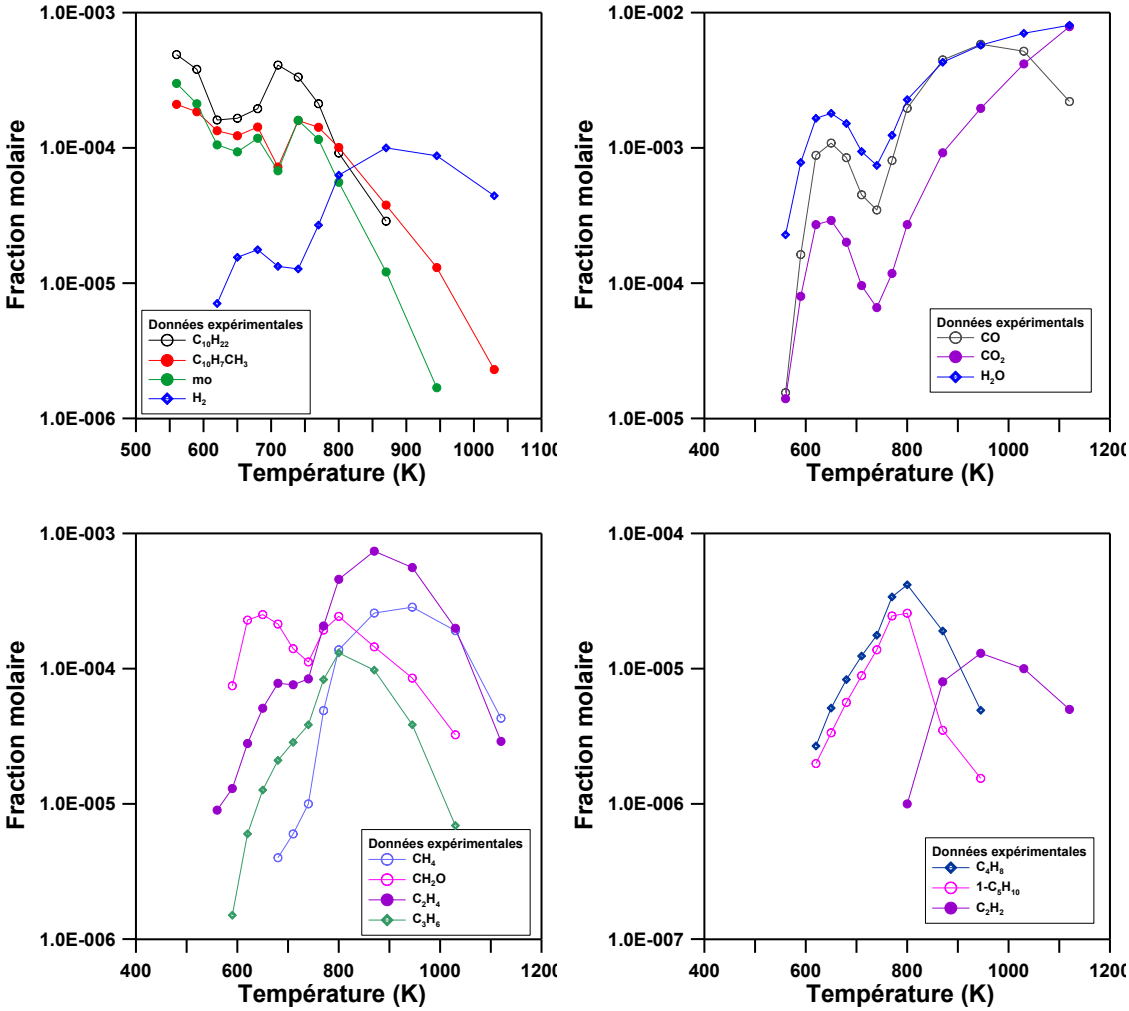


Figure 53. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

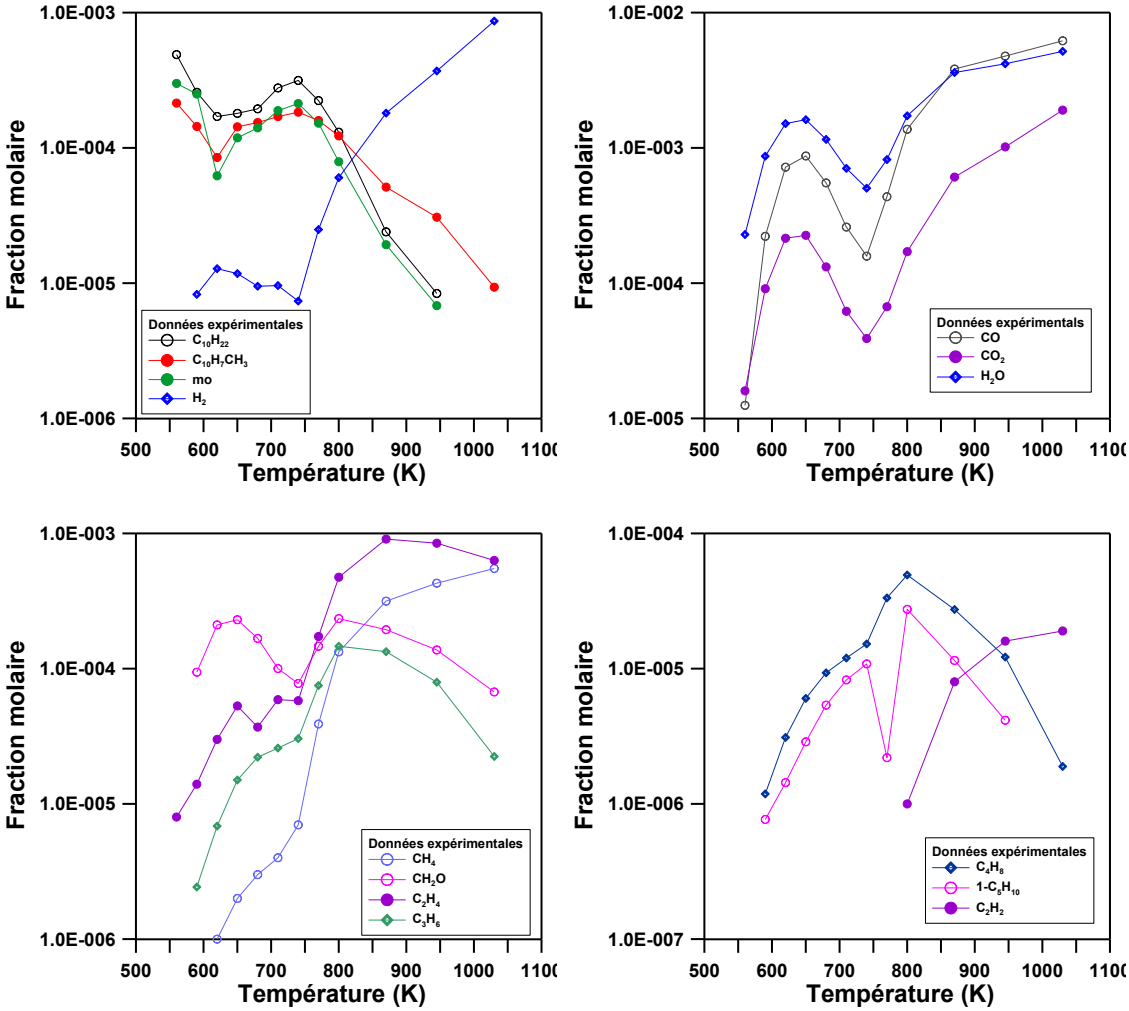


Figure 54. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

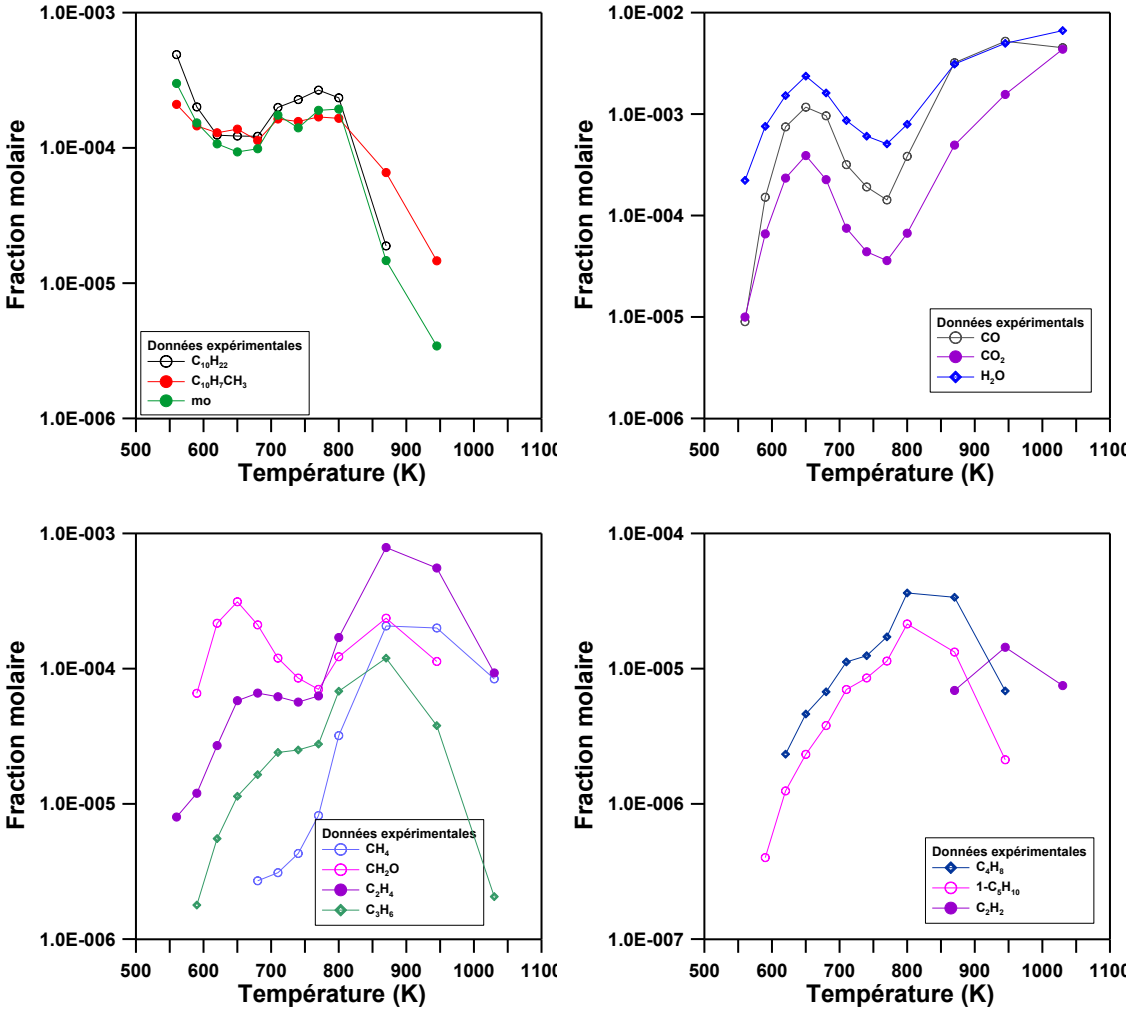


Figure 55. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=6 bar ; φ=0,5 ; τ=0,6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

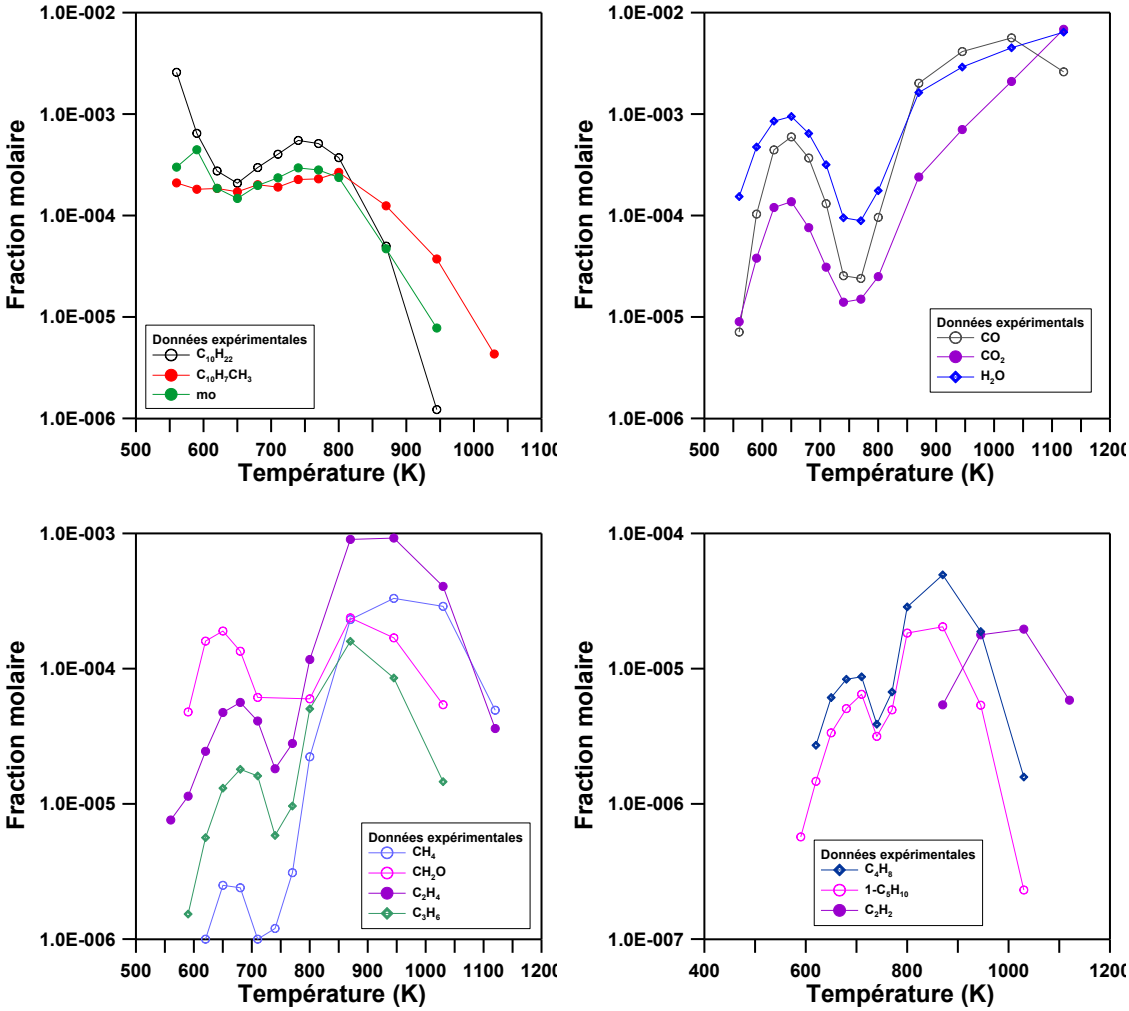


Figure 56. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=6 bar ; φ=1,0 ; τ=0,6s ; X_{HC}= 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.3.5 Comparaison des cinétiques d'oxydation du carburant réel et du carburant modèle

a) Oxydation du gazole réel par rapport au carburant modèle de type gazole

On a comparé les profils de concentration des espèces intermédiaires et produits mesurés lors de l'oxydation du gazole commercial et du carburant modèle de type gazole pour tous les régimes de températures, à 10 bar, et deux richesses : 0,25 (Figure 57) et 1 (Figure 58).

Comme on peut l'observer sur ces figures, les profils de fractions molaires obtenus pour le CO, le CO_2, le H_2O et l'O_2 lors de l'oxydation de ces deux carburants− réel et modèle− sont très similaires sur toute la gamme de conditions expérimentales.

Les profils de concentrations de CH_4 et de H_2 produits par l'oxydation du carburant gazole ont tendance à être plus élevés que ceux obtenus avec le carburant modèle, tandis que les profils de C_2H_4 et C_3H_6 ont montré un comportement inverse. Cette tendance est due à la teneur en *n*-alcane plus élevée dans le carburant modèle, conduisant a une formation plus importante d'éthylène et de propylène par β-scission.

La formation supérieure de méthane est probablement due à la présence d'hydrocarbures ramifiés (iso-paraffines) dans le carburant réel alors que ces composés ne sont pas inclus dans le carburant modèle. Cependant, les résultats présentés confirment que le carburant modèle est approprié pour étudier la cinétique d'oxydation d'un gazole réel.

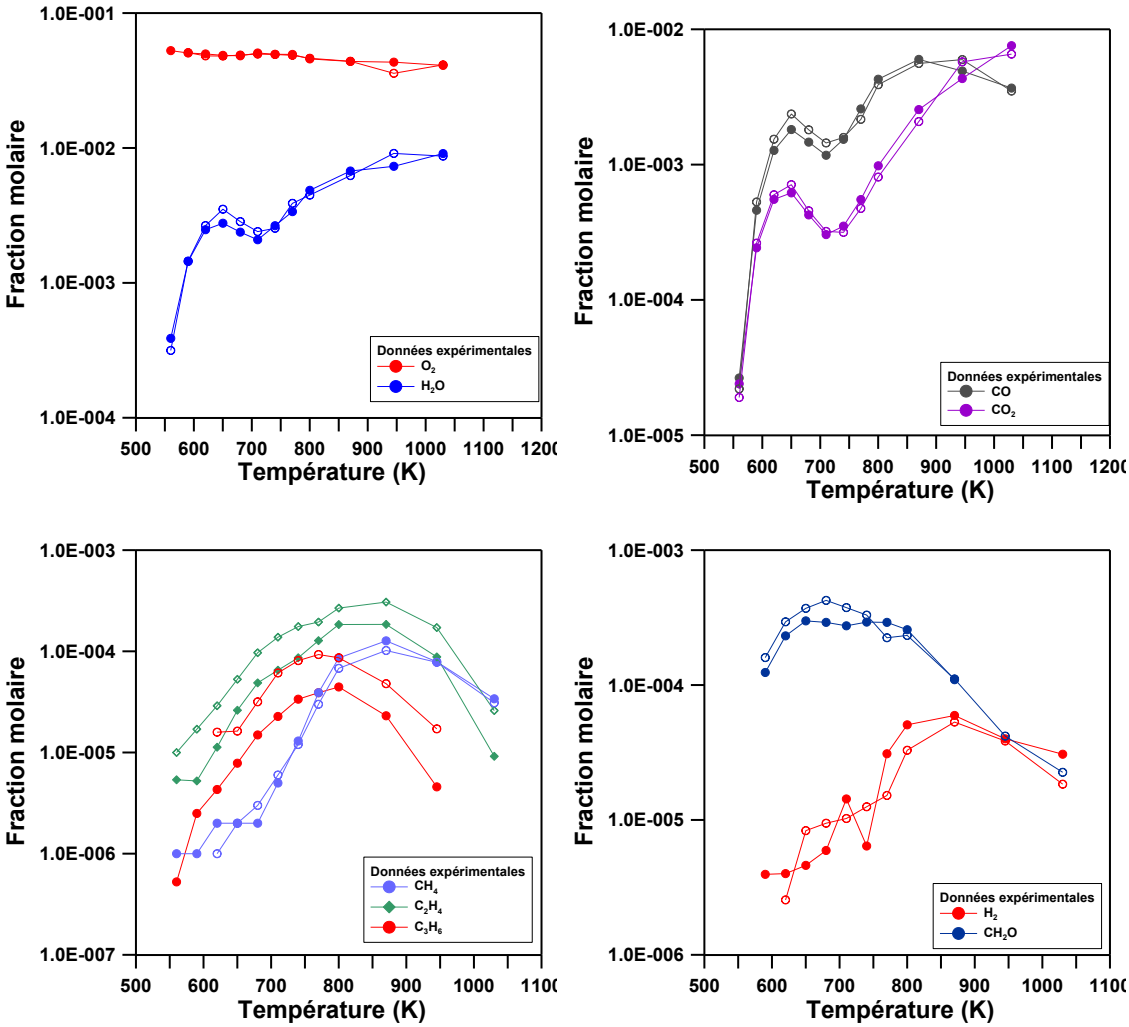


Figure 57. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) : φ=0,25, 10 bar etτ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

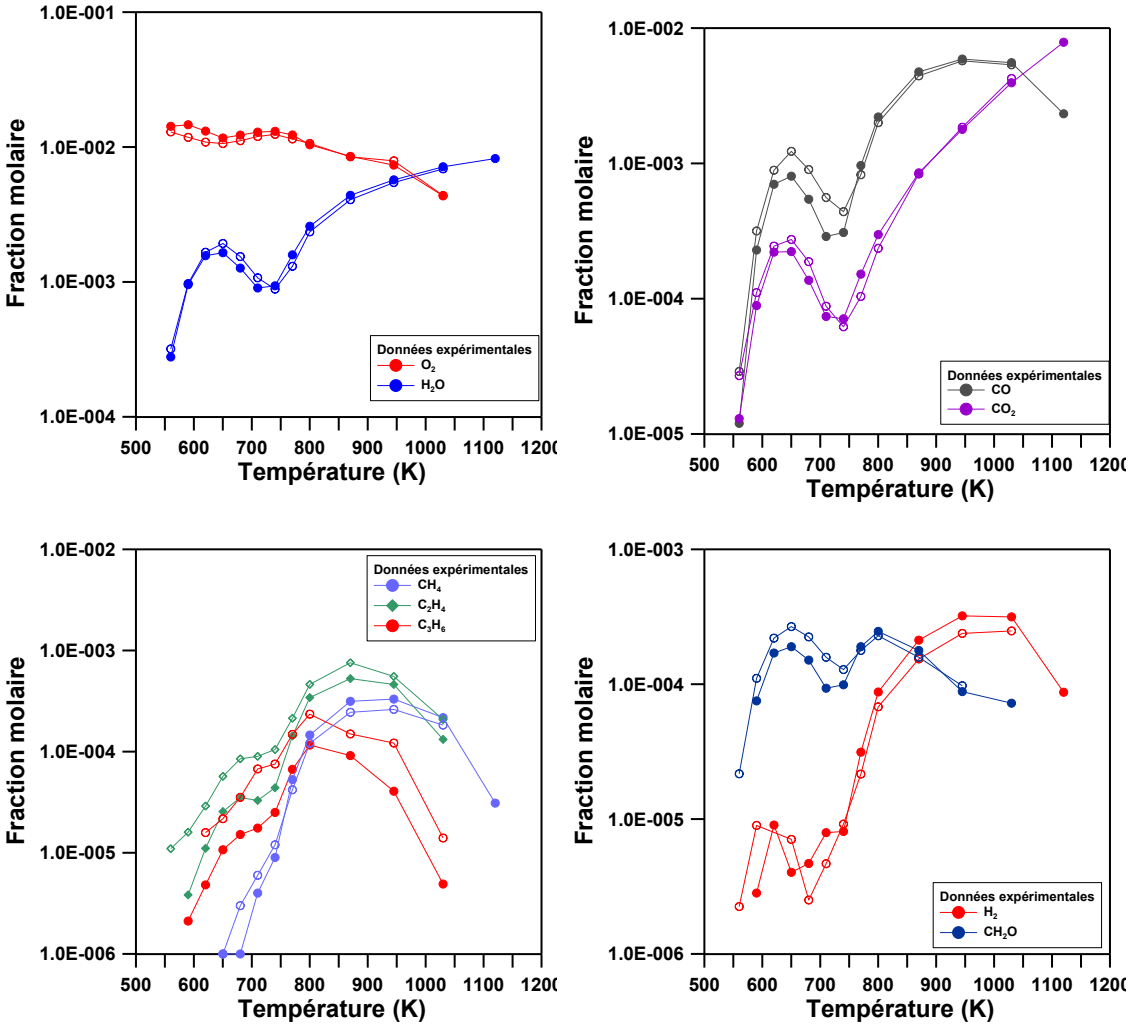


Figure 58. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) : φ=1, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

b) Oxydation du B30 réel par rapport au carburant modèle de type B30

Les profils de fractions molaires mesurés lors de l'oxydation du B30 commercial et du B30 modèle ont été comparés dans toutes les conditions expérimentales étudiées. Comme on peut le voir sur la Figure 59 (φ=0,25) et la Figure 60 (φ=1), les profils de fractions molaires des espèces intermédiaires et produits de combustion obtenus pour CO, CO_2, H_2O et O_2, au cours de l'oxydation des deux carburants, sont très similaires dans toute la gamme de conditions expérimentales.

Comme pour le cas du gazole, un comportement similaire a été observé lors de la comparaison des profils de concentration de C_2H_4 et C_3H_6 produits par l'oxydation du B30 réel et du B30 modèle. Ces profils se sont montrés légèrement plus élevés

avec le carburant modèle qu'avec le B30 réel. Cette tendance, comme dans le cas du gazole, peut être expliquée par une fraction molaire initiale de *n*-alcanes plus élevée dans le carburant modèle, fournissant plus d'éthylène et de propylène grâce aux β-scissions.

Ces résultats ont indiqué que le carburant modèle de type B30 proposé dans cette étude est approprié pour étudier la cinétique d'oxydation d'un carburant B30 commercial.

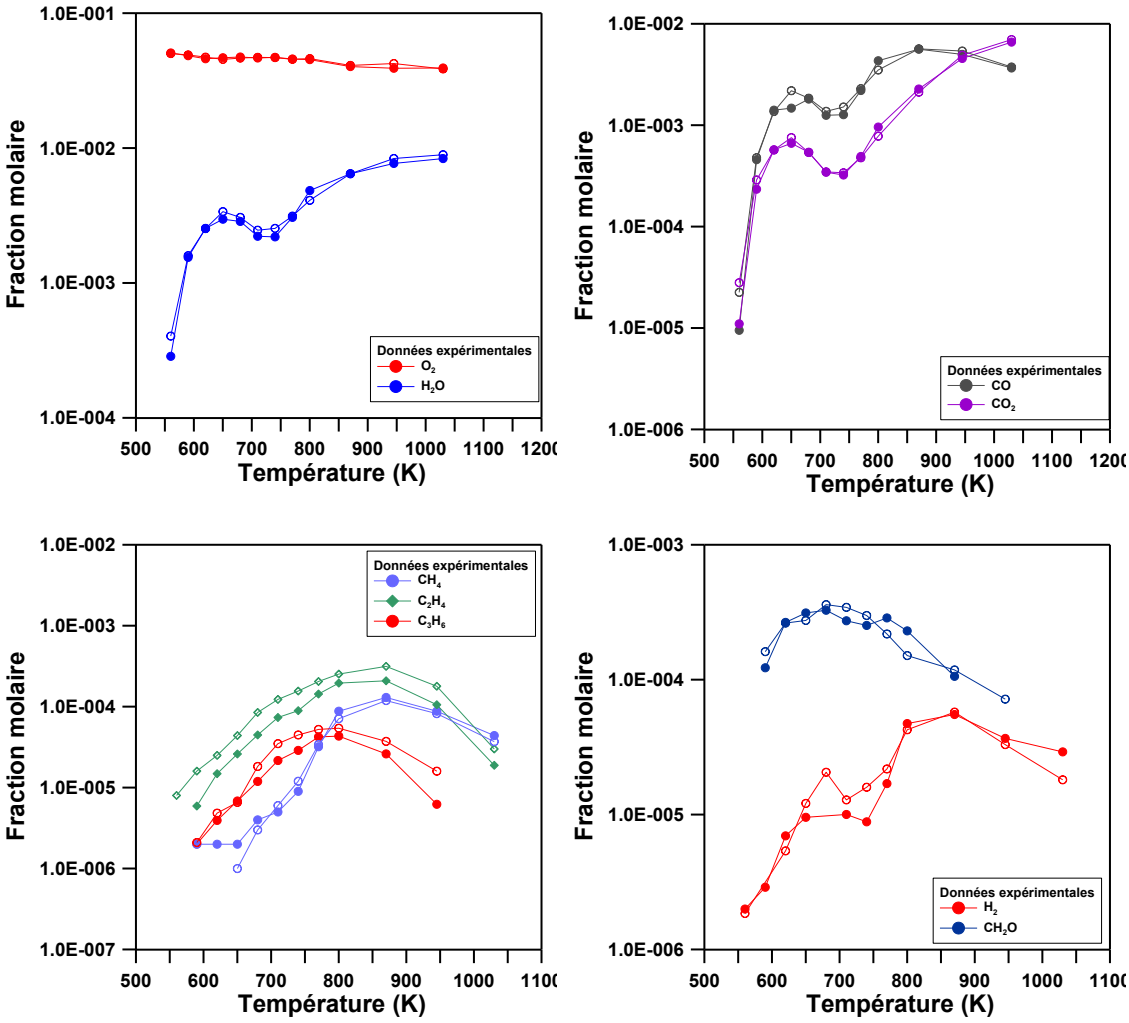


Figure 59. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) : φ=0,25, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

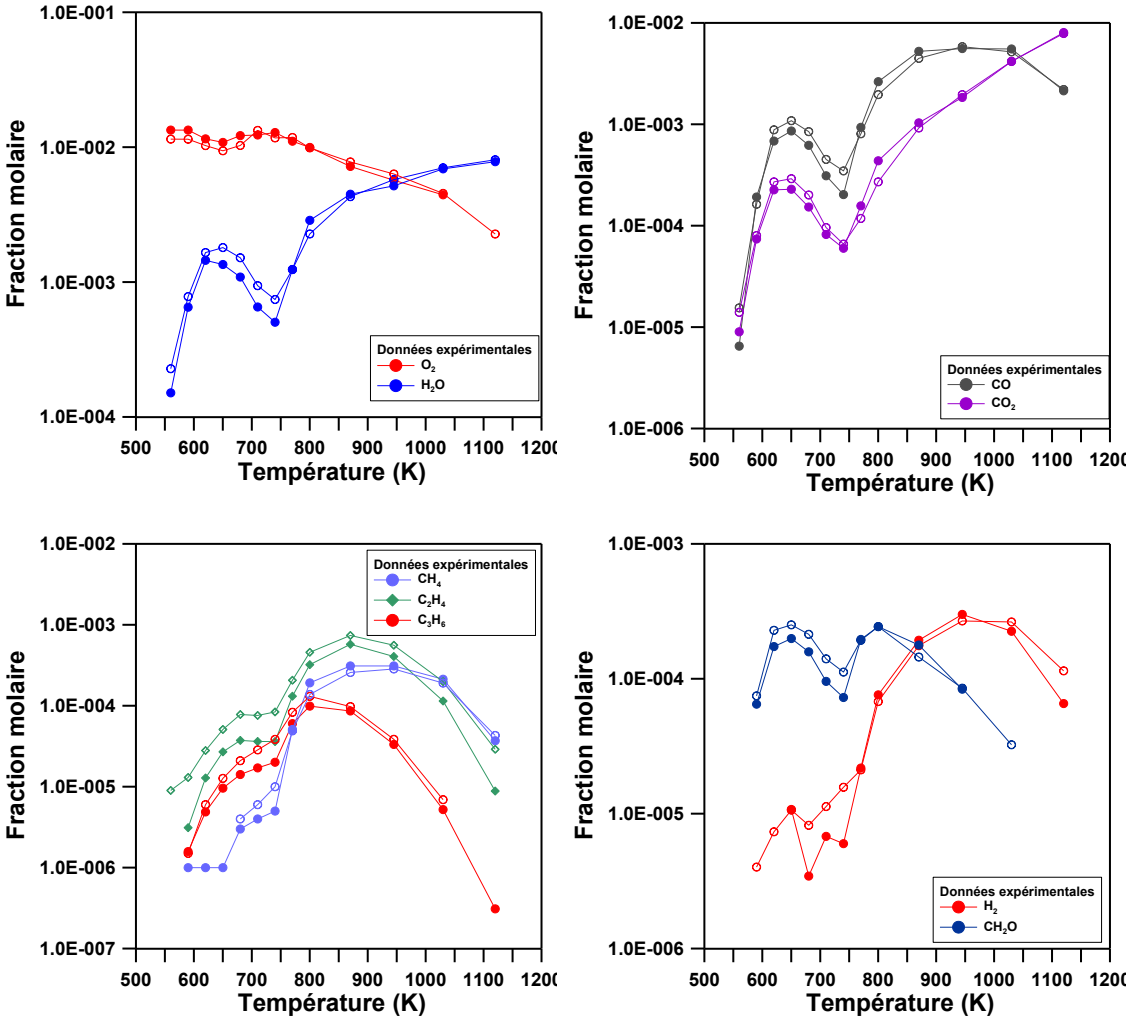


Figure 60. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) : φ=1, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.3.6 Influence de la richesse sur la réactivité de carburant.

Les résultats obtenus indiquent que l'effet de la richesse sur la cinétique d'oxydation des carburants réels et modèles est la même. L'augmentation de la concentration initiale d'oxygène, en gardant la fraction molaire de combustible initiale constante, a entraîné une augmentation du taux de conversion du carburant. Par exemple, la Figure 61 présente des profils d'espèces produites lors de l'oxydation du carburant modèle B30 à 10 bar et φ=1. Comme le montre la Figure 61, l'importance de la zone NTC augmente lorsque la concentration initiale d'oxygène diminue. Ainsi, on peut observer qu'au fur et à mesure que la concentration initiale d'oxygène diminue, les concentrations des espèces intermédiaires stables à haute température deviennent plus élevées (> 800 K). Par exemple, à 10 bar, la fraction molaire maximale du méthane atteint 551 ppm à une richesse de 1,5 alors qu'elle n'était que de

120 ppm à une richesse de 0,25. Dans les mêmes conditions, la fraction molaire maximale de 1-pentène varie de 10 ppm à φ = 0,25 à 27 ppm à φ = 1,5. Ces variations sont le résultat de la réduction de la concentration de radicaux résultant de la diminution de la concentration initiale en oxygène.

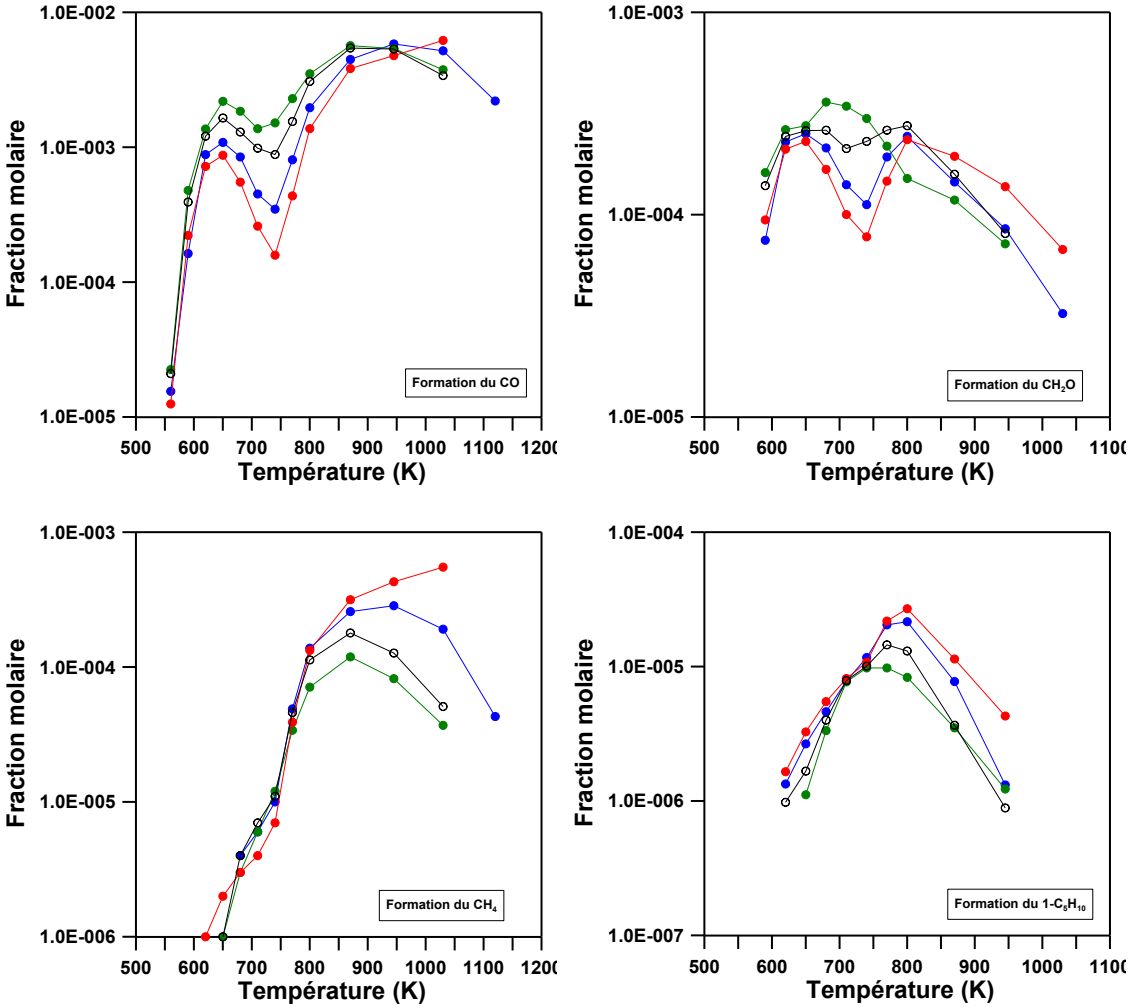


Figure 61. Influence de la richesse sur quelques espèces mesurées lors de l'oxydation en JSR du carburant modèle type B30 à 10 bar et τ=1s pour une richesse de φ=0,25 (symboles verts), φ=0,5 (symboles noirs) φ=1 (symboles bleus) et φ=1,5 (symboles rouges). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.3.7 Influence de la pression sur l'oxydation des carburants

L'effet de la pression totale sur l'oxydation du carburant a été étudiée en comparant les résultats obtenus à 6 et 10 bar pour un carburant modèle type B30 (Figure 62). Sur cette figure on peut observer que NTC est réduit lorsque la pression totale augmente, dû probablement à l'effet de la pression sur les réactions dominantes dans cet intervalle de température. Ranzi *et al.* 1995 ont aussi observé une telle tendance pour l'oxydation du *n*-heptane en JSR dans des conditions similaires.

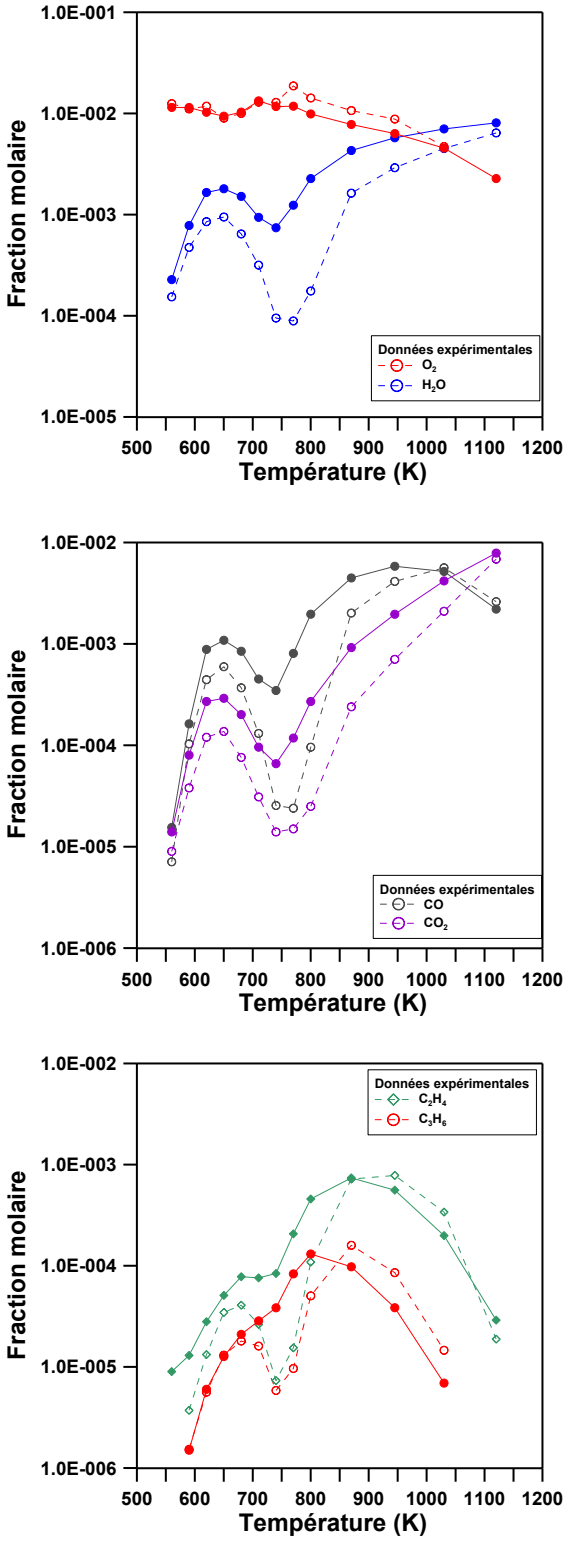


Figure 62. Influence de la pression sur quelques espèces mesurées lors de l'oxydation en JSR du carburant modèle type B30 à 10 bar (symboles remplis) et 6 bar (symboles vides) pour une richesse stœchiométrique. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.4 Développement et validation du modèle cinétique d'oxydation du gazole

La modélisation de la cinétique d'oxydation des carburants est basée sur la cinétique détaillée d'oxydation des constituants purs des carburants modèles. Le modèle cinétique est validé dans un premier temps grâce aux données expérimentales obtenues en JSR et ensuite en utilisant celles issues d'autres dispositifs expérimentaux (tube à choc, flammes).

Le développement du mécanisme repose sur les travaux de modélisation de l'oxydation du *n*-décane réalisés par Dievart 2008 et du 1-méthylnaphthalène réalisés par Mati *et al.* 2007. Ensuite, des réactions d'interaction entre les composants principaux du carburant et ses premiers produits d'oxydation ont été ajoutées. Elles incluent les réactions de métathèse du *n*-décane avec le radical phényle, benzyle, 1-naphtylméthyle, 1-naphtyle, et indényle. Les réactions du vinylnaphtalène avec HO_2 et des radicaux décyles avec le 1-naphtaldehyde ont aussi été considérées. Par soucis de cohérence, les réactions de $C_{10}H_{21}O_2$ avec le toluène, le 1-methylnaphtalène, le 1-naphtyle méthyle, le 1-naphtaldéhyde, le benzyle, le phényle, et le 1-naphtyle ont été ajoutées. Les constantes cinétiques de ces réactions sont basées sur des analogies avec des réactions similaires dans la littérature.

Ce premier mécanisme réactionnel proposé pour l'oxydation des carburants de type gazole est composé de 4762 réactions réversibles et de 1124 espèces. Les calculs ont été effectués en utilisant le code de calcul PSR.

3.4.1 Base C_0-C_4

Le mécanisme détaillé d'oxydation du *n*-décane a été développé par Diévart pour modéliser l'oxydation de cet alcane en JSR à basse température. Ce mécanisme utilise les sous-modèles de Le Cong 2007 (C_0-C_2) −avec des modifications de constantes cinétiques issues de la littérature−, de Curran *et al.* 2002 (C_3) et de Yahyaoui 2005 (C_3-C_4) ; le sous-mécanisme d'oxydation de basse température du *n*-décane a été généré par EXGAS (Warth et al. 1998). Le mécanisme du *n*-décane de Diévart prédit de manière satisfaisante ses résultats expérimentaux pour le régime à basse température ainsi que pour le NTC (500-750K).

Dans le mécanisme proposé dans cette étude, la base C_0-C_4 n'a pas été modifiée pour le mécanisme *n*-décane/1-méthylnaphtalène puisque le modèle représente bien les expériences en JSR.

3.4.2 Le sous-mécanisme d'oxydation du *n*-décane

Comme indiqué précédemment, Diévart a aussi pris en compte un modèle généré automatiquement par Exgas pour l'oxydation du *n*-décane. Ce générateur

automatique de mécanisme a été choisi car ce logiciel tient en compte les réactions à basse température. La principale difficulté de ce mécanisme à été de mettre en place le régime à basse température pour l'oxydation du *n*-décane puisque dans la plupart des modèles proposés dans la littérature se limitent généralement au régime à haute température.

En général ce logiciel intègre une base réactionnelle C_0-C_6, qui inclut aussi les sous-mécanismes d'oxydation du benzène et du toluène. Ensuite, il intègre les mécanismes primaires détaillés du réactif initial, qui incluent la décomposition des radicaux par rupture C−C et C−H, les réactions d'oxydation de métathèse, d'isomérisation, de peroxydation, entre autres. Et enfin, un mécanisme secondaire pour la dégradation des produits primaires formés lors de l'étape précédente. Les propriétés thermodynamiques de ces nouvelles espèces issues des mécanismes primaires et secondaires ont été déterminées par les logiciels Thergas (Muller *et al.* 1995) et Kingas (Bloch-Michel 1995).

Le sous-mécanisme d'oxydation du *n*-décane a aussi été basé sur le mécanisme d'oxydation d'un gazole de Dagaut 2002 et Mati *et al.* 2007. Ce mécanisme a été validé pour un régime à haute température (entre 800 et 1400K) et inclut les mécanismes d'oxydation validés pour le *n*-propylcyclohexane et le *n*-propylbenzène (Mati 2000 et Ristori 2000).

Une des dernières étapes dans la consolidation du mécanisme a consisté en la réévaluation des constantes de vitesses et de la recombinaison des différentes espèces du mécanisme. Pour tous les mécanismes on a adopté la nomenclature choisie par Diévart qui consiste à attribuer à chaque atome de carbone de la molécule de départ une lettre en majuscule, à chaque groupe fonctionnel une lettre ou un groupe de lettres en minuscule et un chiffre à chaque liaison carbone-carbone. On présente quelques exemples dans le Tableau 25.

Tableau 25. Quelques nomenclatures des espèces utilisées par Dievart 2008 et adoptées dans ce travail.

Nom	Formule développée
Cc10h21	
c10h20-3	
c10h21ojB	
c10h20rGqD	
c10h20o-BE	
c10h20qjEqC	
c10h19oCqD	

En utilisant cette nouvelle nomenclature qui fait la distinction entre les isomères, on peut écrire les voies de dégradation spécifiques à chaque isomère, comme par exemple :

c10h19oAqC → oh+ch2hco+c7h15hco
c10h19oBqE → oh+ch3coc2h4+c5h11hco
c10h19oEqG → oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9

3.4.3 Le sous-mécanisme d'oxydation du 1-méthylnaphtalène

Le sous mécanisme réactionnel utilisé pour l'oxydation du 1-méthylnaphtalène a été mis au point par Mati *et al.* 2007. Il est constitué de 1041 réactions réversibles et de 146 espèces. Puisque très peu de mesures directes et d'analyses théoriques sont disponibles, ce mécanisme a été principalement construit par analogie avec les sous-mécanismes d'oxydation du benzène et du toluène, comme indiqué ci-dessous.

Le sous-mécanisme proposé par Mati *et al.* 2007 fait suite aux travaux de Ristori portant sur l'oxydation de composés aromatiques en JSR à 1 bar. Mati a également pris en compte les travaux de Chang *et al.* 2000 pour la rupture de la liaison C−C du groupe méthyle et les constantes cinétiques de Marinov *et al.* 1996 pour la décomposition thermique du 1-méthylnaphtalène en radical $C_{10}H_7CH_2$:

$$C_{10}H_7CH_3 = C_{10}H_7CH_2 + H$$
$$C_{10}H_7CH_3 = C_{10}H_7 + CH_3$$

Le sous mécanisme d'oxydation du 1-méthylnaphtalène a aussi été basé sur les réactions d'oxydation du toluène des travaux d'Emdee *et al.* 1992, dont les réactions d'arrachement d'atomes d'hydrogène donnant comme produits 1-naphtyle, méthyle naphtyle, naphtalène and 1-naphtaldéhyde.

$$C_{10}H_7CH_3 + HO_2 \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + H2O2$$
$$C_{10}H_7CH_3 + O \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + OH$$
$$C_{10}H_7CH_3 + OH \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + H2O$$
$$C_{10}H_7CH_3 + H \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + H2$$
$$C_{10}H_7CH_3 + H \rightleftarrows C_{10}H_8 + CH_3$$
$$C_{10}H_7CH_3 + CH_3 \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + CH_4$$
$$C_{10}H_7CH_3 + C_{10}H_7 \rightleftarrows C_{10}H_8 + C_{10}H_7CH_2$$
$$C_{10}H_7CH_3 + C_{10}H_7CO \rightleftarrows C_{10}H_7HCO + C_{10}H_7CH_2$$

Les cinétiques de réaction du radical HO_2 ont été estimées grâce aux compilations de Baulch *et al.* 1994 ; les paramètres cinétiques pour l'arrachement d'atomes d'hydrogène par les radicaux O, OH et H ont été estimés à partir des travaux de Marinov *et al.* 1996 et enfin, la cinétique de l'arrachement d'hydrogène par le radical méthyle a été estimée à partir des travaux de Colket *et al.* 1994.

Dans le sous-mécanisme d'oxydation du 1-methylnaphtalène, Mati a pris en compte le sous-mécanisme de consommation du naphtalène –en analogie avec les réactions d'arrachement d'hydrogène du benzène− basé principalement sur les recommandations de Baulch *et al.* 1994, les mesures de Kiefer *et al.* 1985, et les travaux de Zhang *et al.* 1998 et Asaba *et al.* 1971.

3.4.4 Construction du mécanisme d'oxydation du carburant modèle de type gazole (70%n-décane+30% 1-méthylnaphtalène)

On a combiné les deux mécanismes initiaux d'oxydation du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène et on a validé le modèle résultant par simulation des données expérimentales d'oxydation du carburant modèle de type gazole composé de $30\%_{mol}$ de 1-méthylnaphtalène et $70\%_{mol}$ de *n*-décane.

Le couplage de ces deux premiers mécanismes a simplement consisté à l'unification des mécanismes de base C_0-C_4 (à partir de travaux de Diévart comme mentionné auparavant), puis on a renommé les espèces en suivant la nomenclature définie par Diévart pour le mécanisme d'oxydation du *n*-décane. Ensuite, les réactions redondantes ont été supprimées et, enfin, les réactions de croisement des espèces lourdes issues de l'oxydation des composés primaires ont été ajoutées au mécanisme. Les réactions ajoutées n'ont pas changé la performance du mécanisme pour l'oxydation du *n*-décane pur ou du 1-méthylnaphtalène pur. L'impact des réactions d'interaction mentionnées précédemment sera étudié plus en détails par la suite.

3.4.5 Influence des modifications apportées : réactions d'interaction

Dans un mélange combustible, on peut s'attendre à ce que les réactions chimiques principales de consommation du carburant impliquent les radicaux O, OH, et H. Toutefois, dans un mélange constitué de deux ou plusieurs composants primaires, lors de la combustion dans des moteurs Diesel, le mélange combustible est comprimé dès la basse température jusqu'à l'auto-allumage en laissant la place, au début de la compression, à des interactions chimiques entre les différents composants du carburant et ses radicaux via les réactions de type :

$$RH+R_1\bullet \rightleftarrows R\bullet+R_1H$$

$$R_1OO\bullet+RH \rightleftarrows R_1OOH+R\bullet$$

où RH est le carburant, R est un radical alkyle, ROO est un radical alkylpéroxy. En JSR, on peut observer l'influence de ces réactions pour des températures inférieures à 900K (Figure 63). Cet effet est plus important dans les conditions du tube à choc (Chapitre 4).

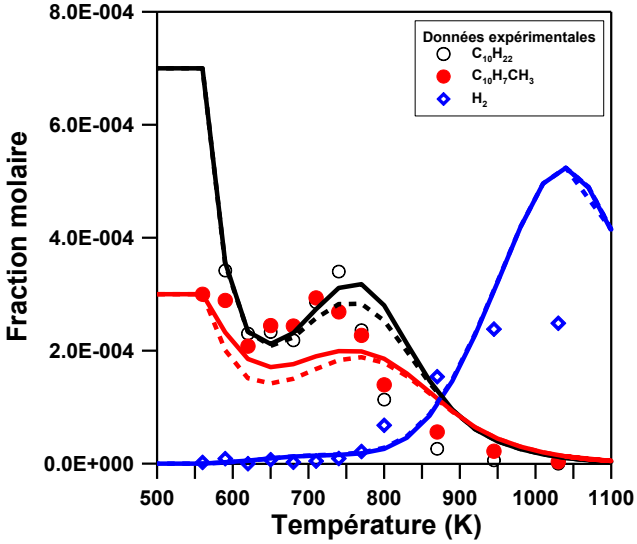


Figure 63. Changements apportés par les réactions d'interaction sur les prédictions en JSR : modèle de départ (lignes discontinues), modèle avec les réactions d'interaction (lignes continues) et les expériences (symboles) d'oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : φ=1, 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

Si les réactions d'interaction sont négligées, elles peuvent entraîner des imprécisions dans les modélisations. Pour mieux comprendre l'importance de ces réactions, Andrae *et al.* 2005 proposent un exemple simple qui montre clairement l'importance de ces réactions. Supposons que deux réactifs A et B réagissent pour former C:

$$2A \rightarrow C;\ \text{avec}\quad -r_1 = k_1 C_A^2$$

$$2B \rightarrow C;\ \text{avec}\quad -r_2 = k_2 C_B^2$$

Si l'on mélange A et B, on pourrait estimer que seules ces réactions se produisent. On pourrait aussi supposer que A et B peuvent réagir l'un avec l'autre, ce qui correspond à prendre en compte les réactions d'interaction entre les composants du départ

$$A+B \rightarrow C; \text{ avec } -r_3 = k_3 C_A C_B.$$

Si l'on considère un mélange de A et B avec une concentration totale $C_T = C_A + C_B$ la vitesse de réaction devient

$$-r = -(r_1 + r_2 + r_3) = k_1 C_A^2 + k_2 C_B^2 + k_3 C_A C_B = (k_1 \alpha^2 + k_2 (1-\alpha)^2 + k_3 \alpha (1-\alpha)\, C_T^2$$

où $\alpha = C_A / C_T$

Plusieurs travaux (Zabarnick 1993, Zabarnick 1998 et Kuprowicz *et al.* 2004) ont traité de l'importance des réactions d'interaction à basse température comme l'auto-oxydation d'hydrocarbures, en utilisant les réactions d'interaction dans les mécanismes pseudo-détaillés pour décrire l'oxydation à basse température des hydrocarbures et des antioxydants.

Les réactions d'interaction ajoutées pour cette première validation du mécanisme en JSR sont énumérées dans le Tableau 26; elles s'inspirent des travaux d'Andrae *et al.* 2005, Allara *et al.* 1980, Emdee *et al.* 1992, Scott *et al.* 2002, Mati 2000 et Dievart 2008.

Tableau 26. Réactions d'interaction considerées dans le schéma pour la modélisation de l'oxydation de carburants bio-Diesel/gazole [k = A T^n exp(-E/RT) en cal, mol, cm^3]

Réactions	***A***	***n***	***E***
nc10h22+phch2⇌Ac10h21+toluen	7.94E+11	0.0	20500
nc10h22+phch2⇌Bc10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200
nc10h22+phch2⇌Cc10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200
nc10h22+phch2⇌Dc10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200
nc10h22+phch2⇌Ec10h21+toluen	7.94E+11	0.0	16200
c10h21qA+phch2⇌c10h21qjA+toluen	1.05E+11	0.0	9500
c10h21qB+phch2⇌c10h21qjB+toluen	1.05E+11	0.0	9500
c10h21qC+phch2⇌c10h21qjC+toluen	1.05E+11	0.0	9500
c10h21qD+phch2⇌c10h21qjD+toluen	1.05E+11	0.0	9500
c10h21qE+phch2⇌c10h21qjE+toluen	1.05E+11	0.0	9500
nc10h22+c6h5⇌Ac10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	20500
nc10h22+c6h5⇌Bc10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200
nc10h22+c6h5⇌Cc10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200
nc10h22+c6h5⇌Dc10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200
nc10h22+c6h5⇌Ec10h21+c6h6	7.94E+11	0.0	16200
nc10h22+c10h7ch2⇌Ac10h21+c10h7ch3	7.50E+11	0.0	8000
nc10h22+c10h7ch2⇌Bc10h21+c10h7ch3	5.00E+11	0.0	7000
nc10h22+c10h7ch2⇌Cc10h21+c10h7ch3	5.00E+11	0.0	7000

nc10h22+c10h7ch2⇌Dc10h21+c10h7ch3	5.00E+11	0.0	7000
nc10h22+c10h7ch2⇌Ec10h21+c10h7ch3	5.00E+11	0.0	7000
c10h7ch3+c10h21qjA⇌c10h7ch2+c10h21qA	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch3+c10h21qjB⇌c10h7ch2+c10h21qB	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch3+c10h21qjC⇌c10h7ch2+c10h21qC	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch3+c10h21qjD⇌c10h7ch2+c10h21qD	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch3+c10h21qjE⇌c10h7ch2+c10h21qE	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch2+c10h21qjA⇌c10h7ch2o+c10h21ojA	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch2+c10h21qjB⇌c10h7ch2o+c10h21ojB	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch2+c10h21qjC⇌c10h7ch2o+c10h21ojC	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch2+c10h21qjD⇌c10h7ch2o+c10h21ojD	3.00E+12	0.0	12000
c10h7ch2+c10h21qjE⇌c10h7ch2o+c10h21ojE	3.00E+12	0.0	12000
c10h7hco+c10h21qjA⇌c10h7co+c10h21qA	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+c10h21qjB⇌c10h7co+c10h21qB	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+c10h21qjC⇌c10h7co+c10h21qC	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+c10h21qjD⇌c10h7co+c10h21qD	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+c10h21qjE⇌c10h7co+c10h21qE	3.00E+12	0.0	17000
c10h7c2h3+ho2→A2R5+h2o2+h	6.80E+03	2.5	10115
c10h7c2h3+ho2→c10h7ch2+hco+oh	2.50E+12	1.0	25000
c10h7c2h3+ho2→c10h7hco+ch2+oh	2.50E+12	1.0	25000
c10h7hco+Ac10h21⇌c10h7co+nc10h22	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+Bc10h21⇌c10h7co+nc10h22	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+Cc10h21⇌c10h7co+nc10h22	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+Dc10h21⇌c10h7co+nc10h22	3.00E+12	0.0	17000
c10h7hco+Ec10h21⇌c10h7co+nc10h22	3.00E+12	0.0	17000
phch2+c10h21qjA⇌phch2o+c10h21ojA	3.00E+12	0.0	12000
phch2+c10h21qjB⇌phch2o+c10h21ojB	3.00E+12	0.0	12000
phch2+c10h21qjC⇌phch2o+c10h21ojC	3.00E+12	0.0	12000
phch2+c10h21qjD⇌phch2o+c10h21ojD	3.00E+12	0.0	12000
phch2+c10h21qjE⇌phch2o+c10h21ojE	3.00E+12	0.0	12000
c6h5+c10h21qjA⇌c6h5o+c10h21ojA	3.00E+12	0.0	12000
c6h5+c10h21qjB⇌c6h5o+c10h21ojB	3.00E+12	0.0	12000
c6h5+c10h21qjC⇌c6h5o+c10h21ojC	3.00E+12	0.0	12000
c6h5+c10h21qjD⇌c6h5o+c10h21ojD	3.00E+12	0.0	12000
c6h5+c10h21qjE⇌c6h5o+c10h21ojE	3.00E+12	0.0	12000
indenyl+c10h21qjA⇌indenoxy+c10h21ojA	7.50E+11	0.0	9000
indenyl+c10h21qjB⇌indenoxy+c10h21ojB	5.00E+11	0.0	7000
indenyl+c10h21qjC⇌indenoxy+c10h21ojC	5.00E+11	0.0	7000
indenyl+c10h21qjD⇌indenoxy+c10h21ojD	5.00E+11	0.0	7000
indenyl+c10h21qjE⇌indenoxy+c10h21ojE	5.00E+11	0.0	7000
A2-X+c10h21qjA⇌A2O+c10h21ojA	4.00E+12	0.0	14000

A2-X+c10h21qjB⇌A2O+c10h21ojB	3.00E+12	0.0	12000
A2-X+c10h21qjC⇌A2O+c10h21ojC	3.00E+12	0.0	12000
A2-X+c10h21qjD⇌A2O+c10h21ojD	3.00E+12	0.0	12000
A2-X+c10h21qjE⇌A2O+c10h21ojE	3.00E+12	0.0	12000
A2-X+nc10h22⇌Ac10h21+napht	7.94E+11	0.0	20500
A2-X+nc10h22⇌Bc10h21+napht	7.94E+11	0.0	16200
A2-X+nc10h22⇌Cc10h21+napht	7.94E+11	0.0	16200
A2-X+nc10h22⇌Dc10h21+napht	7.94E+11	0.0	16200
A2-X+nc10h22⇌Ec10h21+napht	7.94E+11	0.0	16200
indenyl+nc10h22⇌indene+Ac10h21	4.61E+11	0.0	7500
indenyl+nc10h22⇌indene+Bc10h21	3.11E+11	0.0	5500
indenyl+nc10h22⇌indene+Cc10h21	3.11E+11	0.0	5500
indenyl+nc10h22⇌indene+Dc10h21	3.11E+11	0.0	5500
indenyl+nc10h22⇌indene+Ec10h21	3.11E+11	0.0	5500
ASTYRYL + Ac10h21 ⇌ phc2h + nc10h22	3.00E+12	0.0	13000

3.4.6 Simulations en réacteur auto-agité

a) Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité

Les profils de concentration obtenus pour l'oxydation du carburant modèle type gazole –IDEA fuel− ont été comparés aux résultats de modélisation. Comme décrit précédemment, un mécanisme cinétique détaillé a été utilisé pour modéliser l'oxydation d'un gazole réel, il inclut le sous-mécanisme d'oxydation du 1-méthylnaphtalène, le sous-mécanisme d'oxydation du *n*-décane ainsi que des réactions d'interaction entre les espèces lourdes issues des premières étapes d'oxydation de chaque composant. Le schéma résultant, contrairement aux anciennes versions de Ristori et Mati, comprend les processus d'oxydation pour tous les régimes de température.

Ce modèle a aussi été validé pour l'oxydation en JSR du *n*-décane pur et du 1-méthylnaphtalène pur dans les mêmes conditions. Des exemples de résultats obtenus à 10 bar (Figure 64 à Figure 67) et 6 bar (Figure 65 à Figure 69). D'après les calculs, dans ces conditions, dans le régime de flamme froide (560 à 720K), le 1-méthylnaphtalène et le *n*-décane sont tous les deux oxydés, formant alors plusieurs produits et principalement, comme on peut le voir sur ces figures, de grandes quantités de CO, CO_2, H_2O, et de formaldéhyde. On peut également observer sur ces figures que la modélisation prévoit assez bien ces profils de fractions molaires. De la même façon, la consommation du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène sont aussi en accord avec les résultats de la modélisation. Ceci est un résultat intéressant car, dans des conditions identiques, et en l'absence du *n*-décane, le 1-méthylnaphtalène ne réagirait pas. En effet, l'oxydation du 1-méthylnaphtalène survient grâce aux radicaux produits lors de l'oxydation du *n*-décane. Des calculs de sensibilité à 620K et dans les conditions d'un mélange pauvre (φ=0.5 à 10bar), montrent que les radicaux OH sont

principalement responsables de l'oxydation du *n*-décane (ca. 79%) et du 1-méthylnaphtalène (ca.95%) via

$$n\text{-}C_{10}H_{22} + OH \rightleftarrows C_{10}H_{21} + H_2O \text{ et}$$
$$C_{10}H_7CH_3 + OH \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + H_2O$$

Dans ces conditions, leur formation est dû à la décomposition des radicaux alkylhydropéroxy et des cétohydropéroxydes (O_2QOOH et OQ'OOH) provenant de l'oxydation du n-décane. Dans les mêmes conditions, lorsque les processus d'oxydation des radicaux alkyles sont plus importants que les réactions de β-scissions, peu de formation d'éthylène est observée, en accord avec le modèle qui indique que celui-ci est produit par la décomposition du C_2H_4OOH.

Au dessus de 750K, on observe la transition vers le régime d'oxydation de haute température. Ici, les composés issus de l'oxydation du carburant sont rapidement consommés par métathèse et une plus importante quantité de produits est formée. Ainsi, une fois de plus, le modèle prédit bien la réactivité globale du carburant observée expérimentalement ainsi que la formation des produits, tandis qu'il tend à sous-estimer les taux d'oxydation en dessous de 900K. Cette tendance résulte de l'effet inhibiteur du 1-méthylnaphtalène sur l'oxydation du *n*-décane qui pourrait provenir du manque de réactions croisées entre le n-décane et le 1-méthylnaphtalène. On peut aussi noter que ce modèle tend à surestimer la formation d'acétylène. Cela est principalement dû au sous-mécanisme d'oxydation du 1-méthylnaphtalène.

A 1040K, les radicaux OH sont pour la plupart responsables de l'oxydation du *n*-décane (80%) et du 1-méthylnaphtalène (90%) via les réactions suivantes :

$$nC_{10}H_{22} + OH \rightleftarrows C_{10}H_{21} + H_2O \text{ et}$$
$$C_{10}H_7CH_3 + OH \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + H_2O$$

Les réactions du *n*-décane avec les atomes O (10%) et H (4.5%) contribuent aussi à sa consommation. De la même façon, les atomes H consomment aussi le 1-méthylnaphtalène (7.5%). Dans ces conditions, la production d'éthylène est principalement due aux réactions de β-scission des radicaux alkyles (1-butyle, 11%; 1-propyle, 21%), tandis que l'oxydation du radical éthyle par l'O_2 contribue également à la formation d'éthylène (19%).

Les résultats présentés ici montrent aussi que l'augmentation de la concentration initiale d'oxygène, tout en gardant constante la fraction molaire du carburant, induit une augmentation du taux d'oxydation du carburant. On observe aussi une augmentation du NTC lorsque la concentration initiale en oxygène diminue. De plus, il est à noter qu'en diminuant la concentration initiale d'oxygène, les espèces intermédiaires atteignent des concentrations maximales croissantes. Par exemple, à 10 bar, la fraction molaire maximum de méthane atteint 536 ppm à une richesse de 1.5, tandis qu'on a mesuré que 102 ppm à φ=0.25. Dans les mêmes conditions, la fraction molaire maximale d'éthylène varie de 300ppm à φ=0.25 à 871ppm à φ=1.5. Ces variations proviennent de la réduction du « pool de radicaux » avec la diminution de la concentration initiale en oxygène, ce qui est en accord avec les observations

faites antérieurement lors de l'oxydation d'une variété de carburants hydrocarbonés, y compris des carburants commerciaux.

Enfin, l'effet de la pression totale sur l'oxydation du carburant a été étudié. La comparaison des résultats expérimentaux et de simulations obtenus à 6 bar montrent encore une fois que le mécanisme prédit avec un bon accord les profils à basse pression.

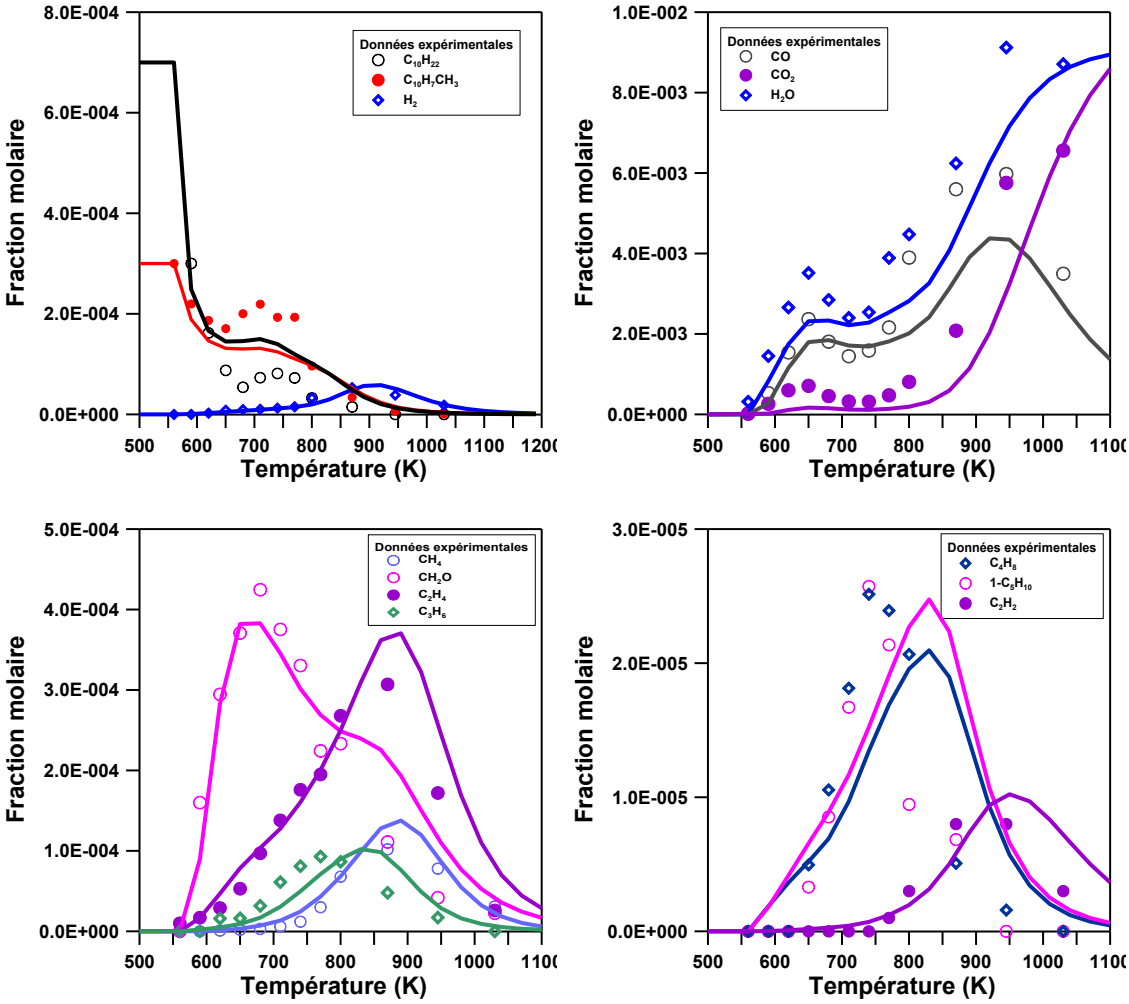


Figure 64. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=0.25, 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

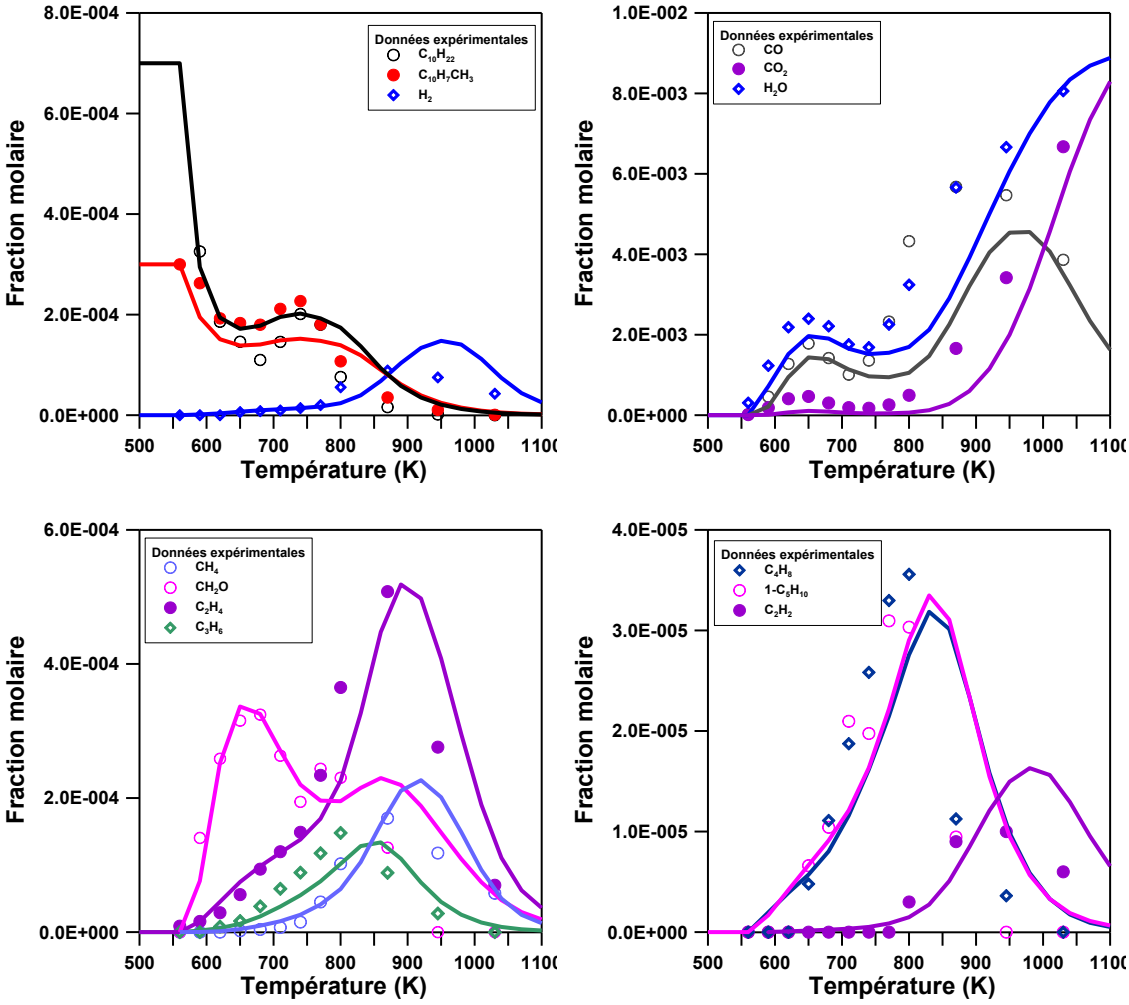


Figure 65. . Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=0.5, 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

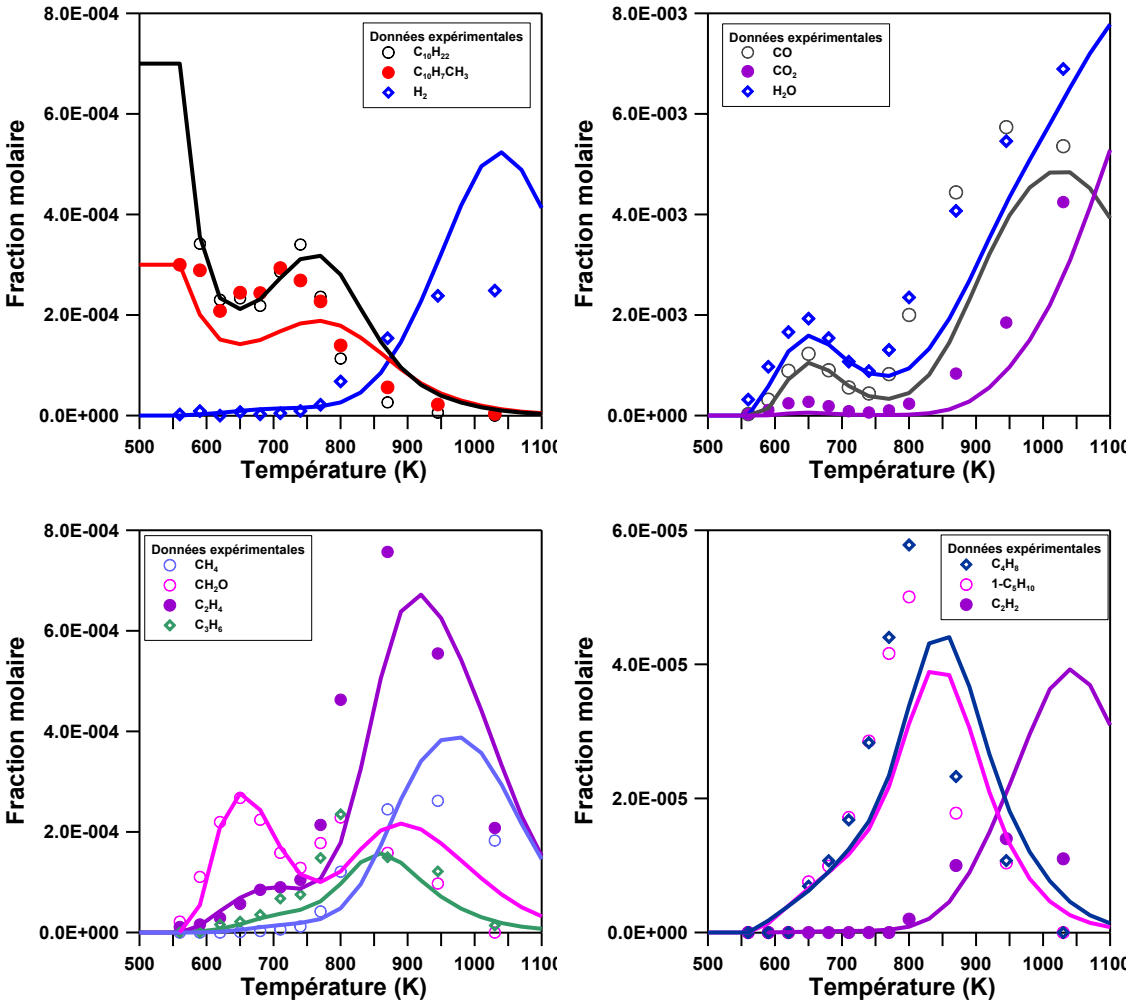


Figure 66. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=1.0 , 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

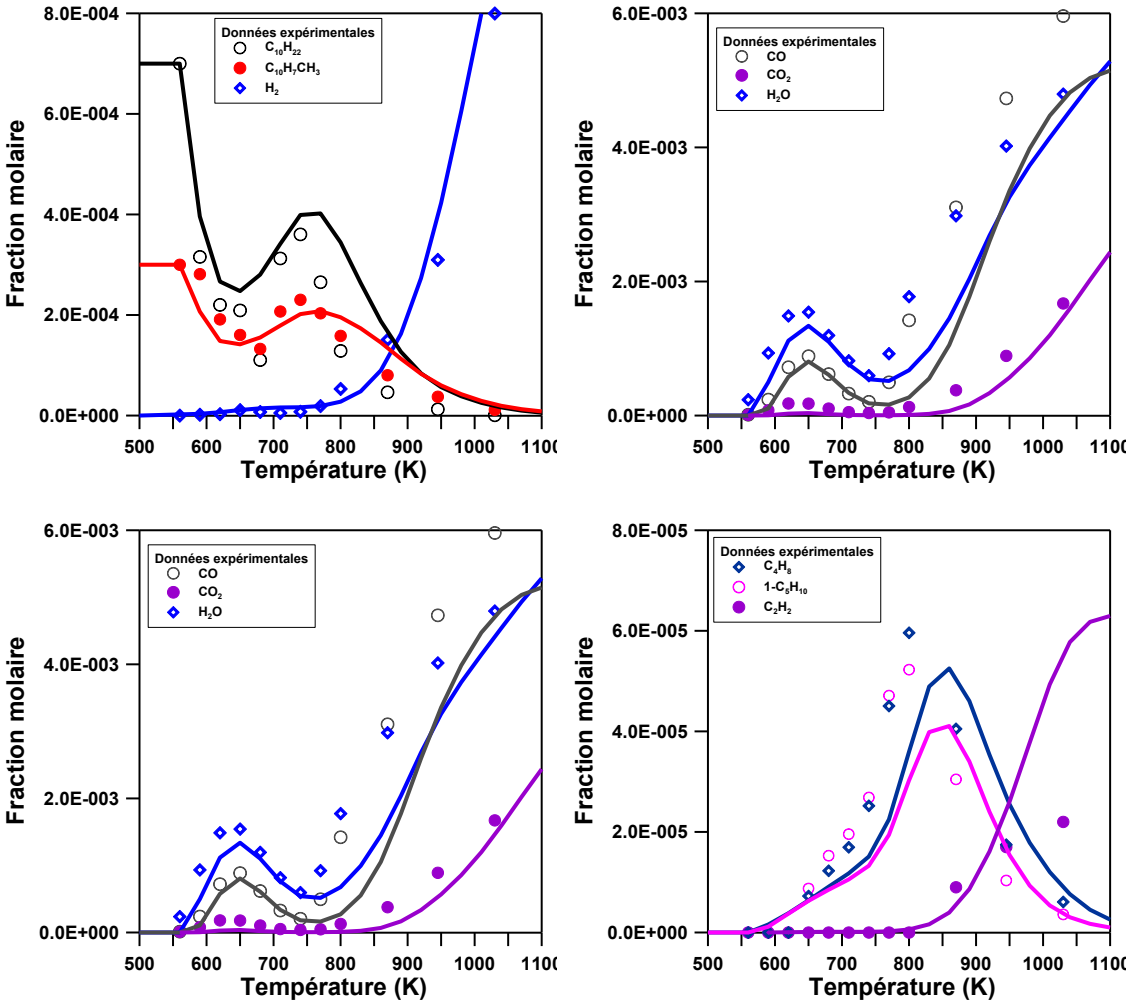


Figure 67. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=1.5 , 10bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

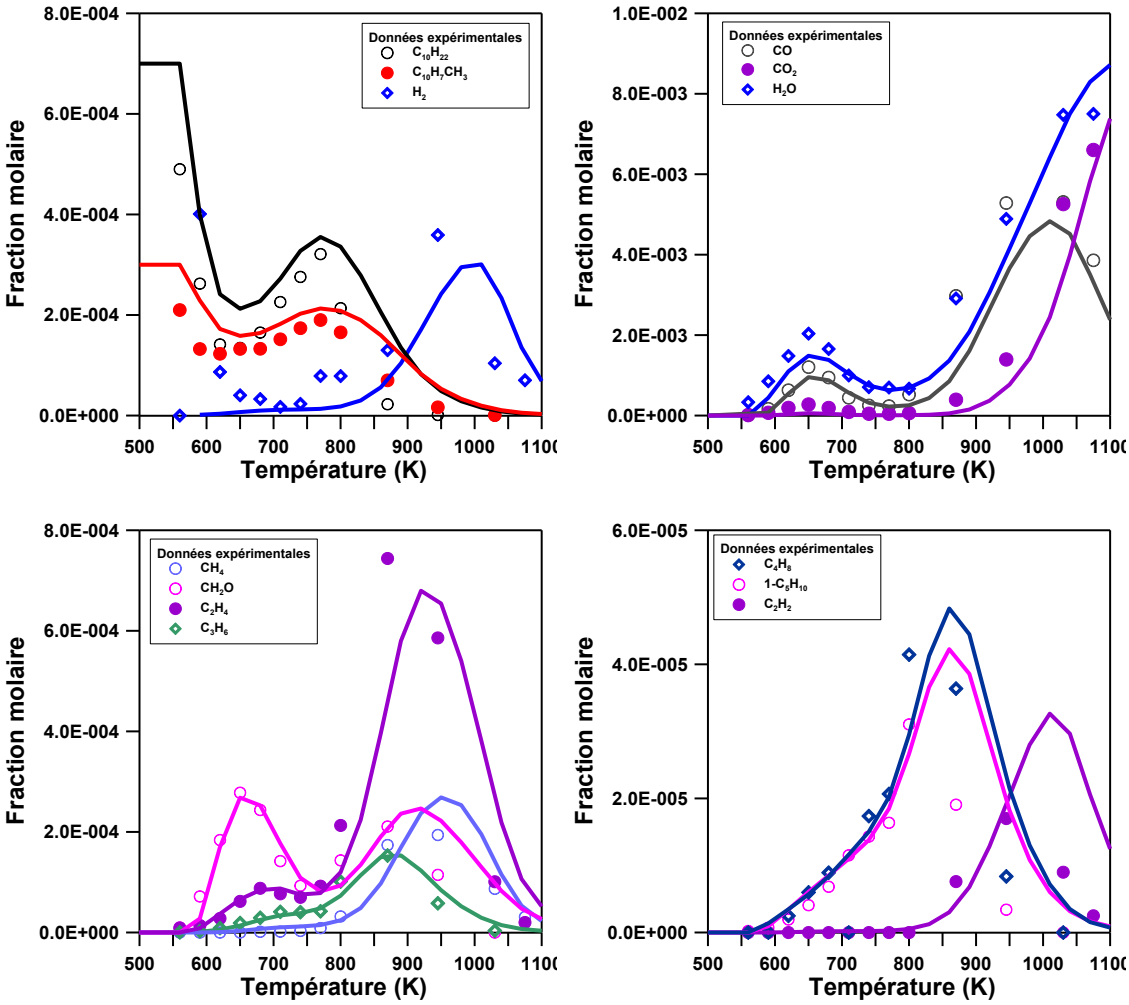


Figure 68. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=0.5 , 6bar et τ=0.6s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

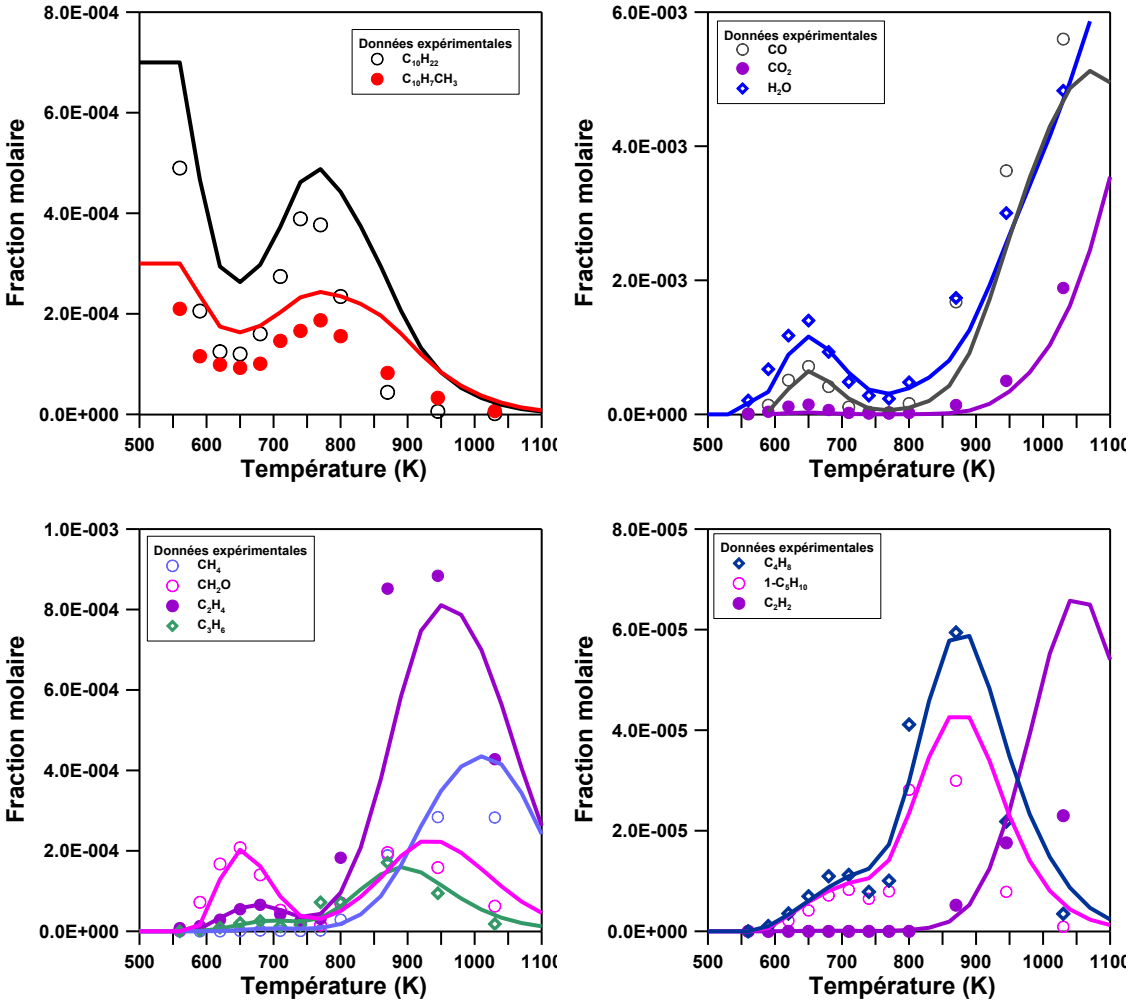


Figure 69. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR : φ=1.0 , 6bar et τ=0.6s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

3.5 Développement et validation du modèle cinétique d'oxydation du carburant de type B30

Apres la consolidation du mécanisme d'oxydation du gazole (Ramirez L *et al.* 2010), le développement et la validation du mécanisme d'oxydation du B30 ont été menés à partir du modèle cinétique d'oxydation du gazole (*n*-décane et méthylnaphtalène) et du modèle d'oxydation de l'octanoate de méthyle de Togbé *et al.* 2009.

Pour ce modèle cinétique, les réactions d'interactions entre les espèces lourdes issues des premières étapes d'oxydation de l'octanoate de méthyle et les espèces lourdes issues des premières étapes d'oxydation du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène n'ont pas été considérées. Le mécanisme réactionnel proposé pour l'oxydation du B30 et du gazole est composé de 7748 réactions réversibles et de 1964 espèces. C'est la première tentative d'établissement d'un schéma cinétique pour l'oxydation de mélanges bio-Diesel /gazole. Les calculs ont été effectués grâce au code de calcul PSR du logiciel CHEMKIN.

3.5.1 Le sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle

Le sous-mécanisme réactionnel utilisé ici présente une structure fortement hiérarchisée. Il est basé sur le mécanisme d'oxydation du gazole proposé ici et étendu par inclusion d'un sous-mécanisme d'oxydation des esters méthyliques.

Pour le mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle, Dayma *et al*. ont réévalué les constantes cinétiques pour les initiations unimoléculaires par rupture des liaisons C−H des réactions telles que

$$\mathrm{MHP6D4D + OH \rightleftarrows H_2O + nC_4H_5 + MP2D}$$

$$\mathrm{MHP6D4D + H \rightleftarrows H_2 + nC_4H_5 + MP2D}$$

$$\mathrm{MO \rightleftarrows MO\#J + H}$$

La cinétique des ruptures de liaisons C−C, l'arrachement de H, les transferts d'atomes d'hydrogène via des états de transition à 5, 6 et 7 membres ont été réévaluées. Les constantes cinétiques des ruptures de liaisons C−O produisant un radical méthoxyle sont issues des travaux de Tsang 1978; Tsang 1988, Sato *et al.* 2000, Dayma *et al.* 2003; Glaude *et al.* 2005.

3.5.2 Construction du mécanisme d'oxydation du carburant modèle de type bio-Diesel(49%*n*-décane /21% 1-méthylnaphtalène/30% octanoate de méthyle)

a) Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité

Comme mentionné précédemment, l'oxydation d'un carburant B30 modèle composé de 49% $_{mol}$ *n*-décane, 21% $_{mol}$ 1-méthylnaphtalène, et 30% $_{mol}$ octanoate de méthyle, c'est à dire $C_{10,3}H_{18,4}O_2$, a été étudiée dans un JSR dans une large gamme de conditions (T : 560-1030K, τ=0.6s à 6 bar, de τ=1s à 10 bar, pour plusieurs richesses 0,25 à 1,5).

Les profils de fractions molaires mesurées lors de l'oxydation du B30 modèle ont été confrontés à ceux prédits par le modèle cinétique. On notera que le couplage des trois modèles d'oxydation du *n*-décane, 1-méthylnaphtalène et de l'octanoate de méthyle n'a pas altéré les prédictions pour l'oxydation du *n*-décane pur, du méthyle octanoate pur et du 1-methylnaphtalène en JSR, dans les mêmes conditions.

Dans ce modèle on a introduit la chimie d'oxydation du méthyle octanoate pour représenter l'oxydation des esters méthyliques présents dans le mélange bio-Diesel/gazole réel. Ainsi, le schéma proposé peut simuler l'oxydation de tous les mélanges bio-Diesel/gazole. Les résultats de la modélisation de l'oxydation du B30 (Figure 70 à Figure 74) ont été confrontés aux résultats des expériences montrant un accord satisfaisant.

D'après les calculs, dans le régime de flamme froide (560–720 K), le méthyle octanoate, le 1-méthylnaphtalène et le *n*-décane sont oxydés, entraînant la formation de nombreux produits. Comme on peut le voir sur ces figures, de grandes quantités de CO, CO_2, H_2O, et de formaldéhyde sont formées dans la flamme froide (pics de concentration des intermédiaires observés à 650 K) et à haute température (pics de concentration de CO et CH_2O observés entre 850 et 900 K). Le modèle cinétique prédit raisonnablement bien ces résultats dans la plupart des cas alors qu'il semble surestimer la fraction molaire de CH_2O pour les mélanges pauvres (Figure 70). Comme pour les simulations de l'oxydation du gazole, les prédictions de la consommation des constituants du B30 modèle montrent un régime d'oxydation de flamme froide (560–800 K), un NTC (650–800 K), ainsi qu'une transition vers une oxydation de haute température (>800K) en accord avec les observations expérimentales.

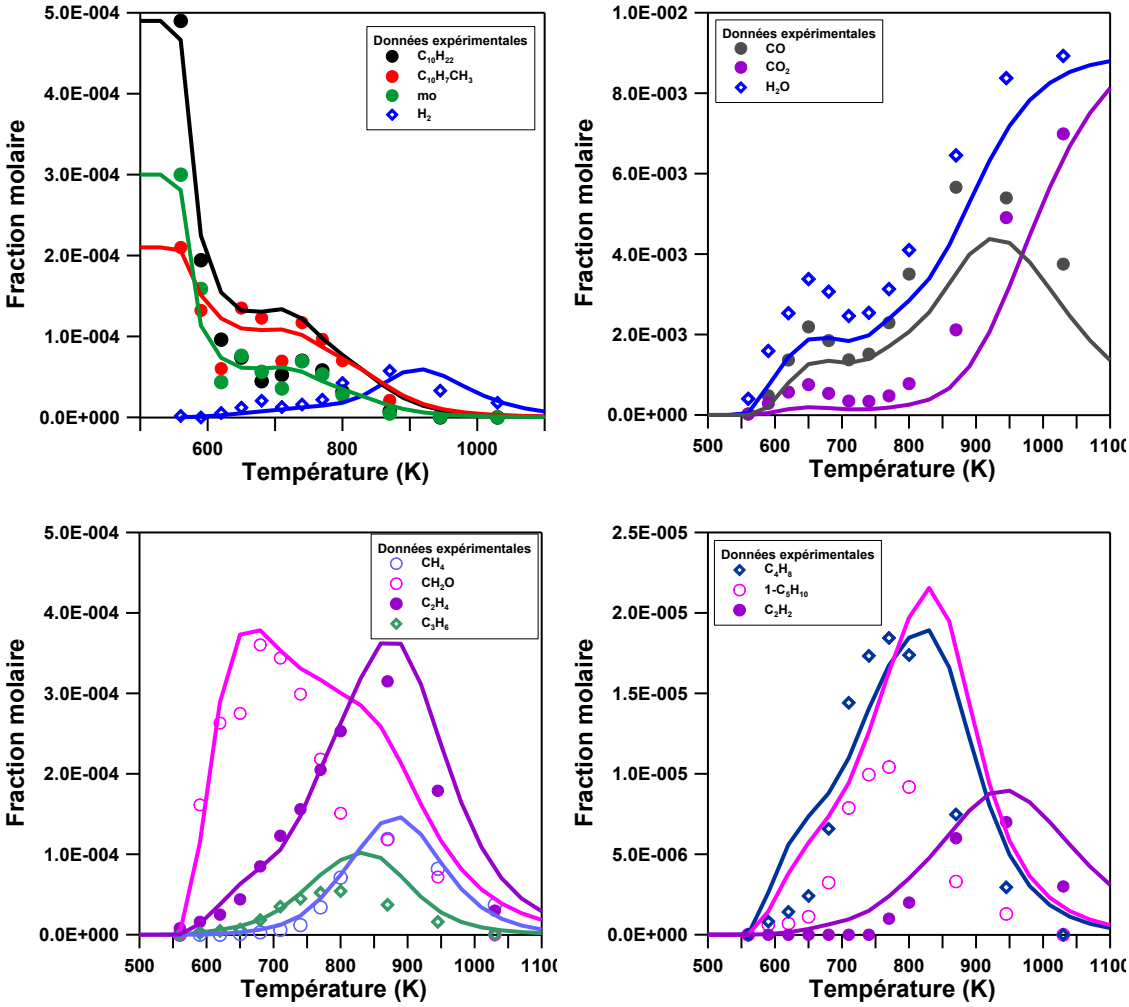


Figure 70. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=0,25 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

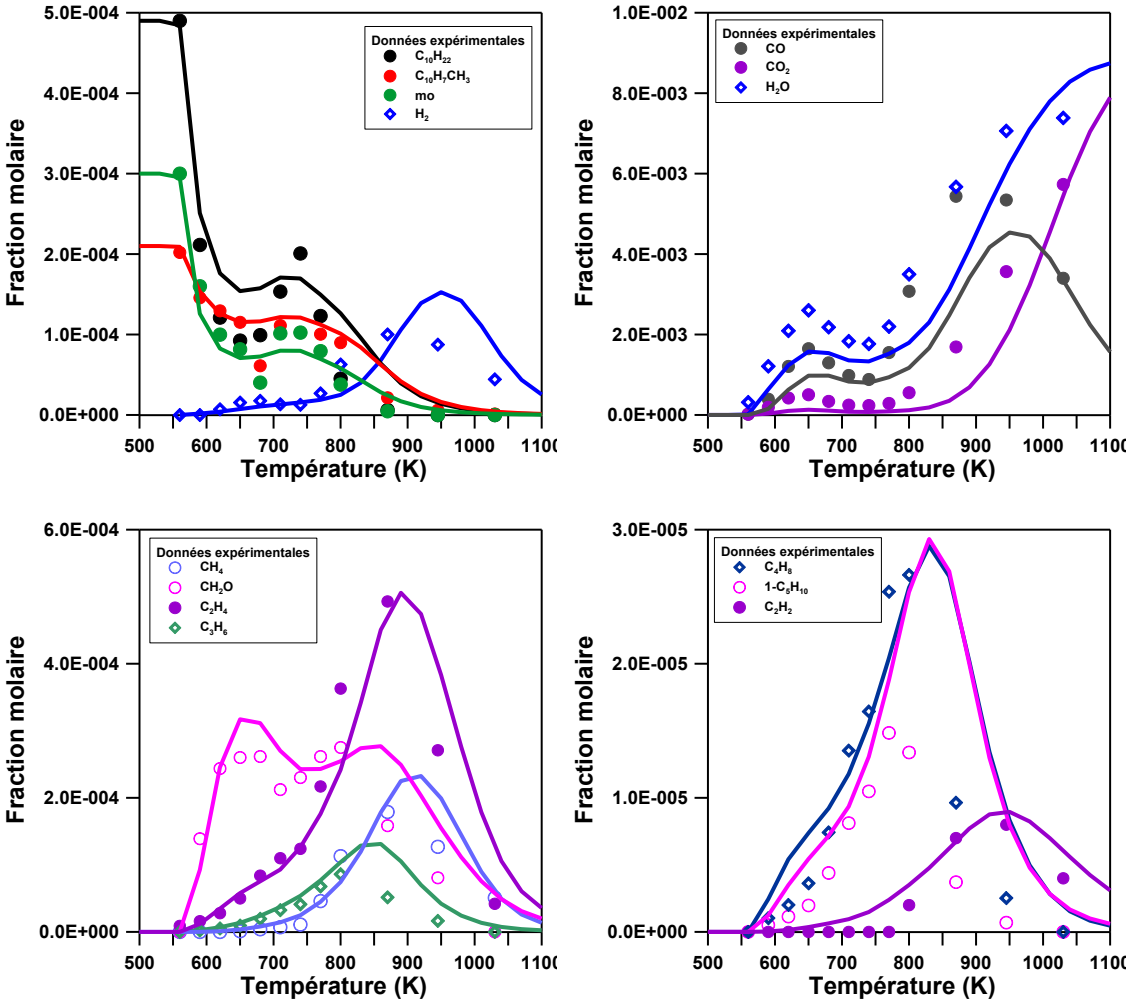


Figure 71. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=0,5 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

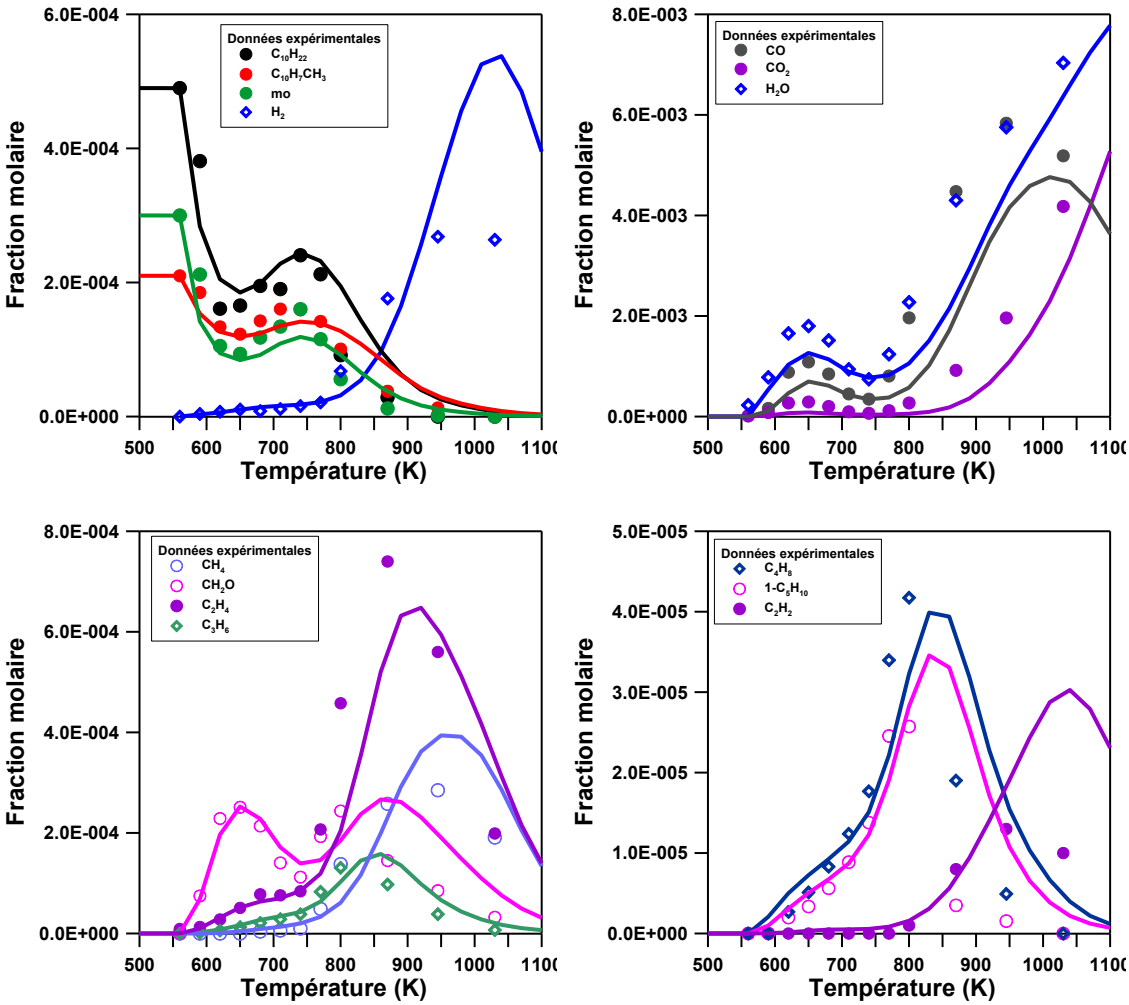


Figure 72. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=1 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

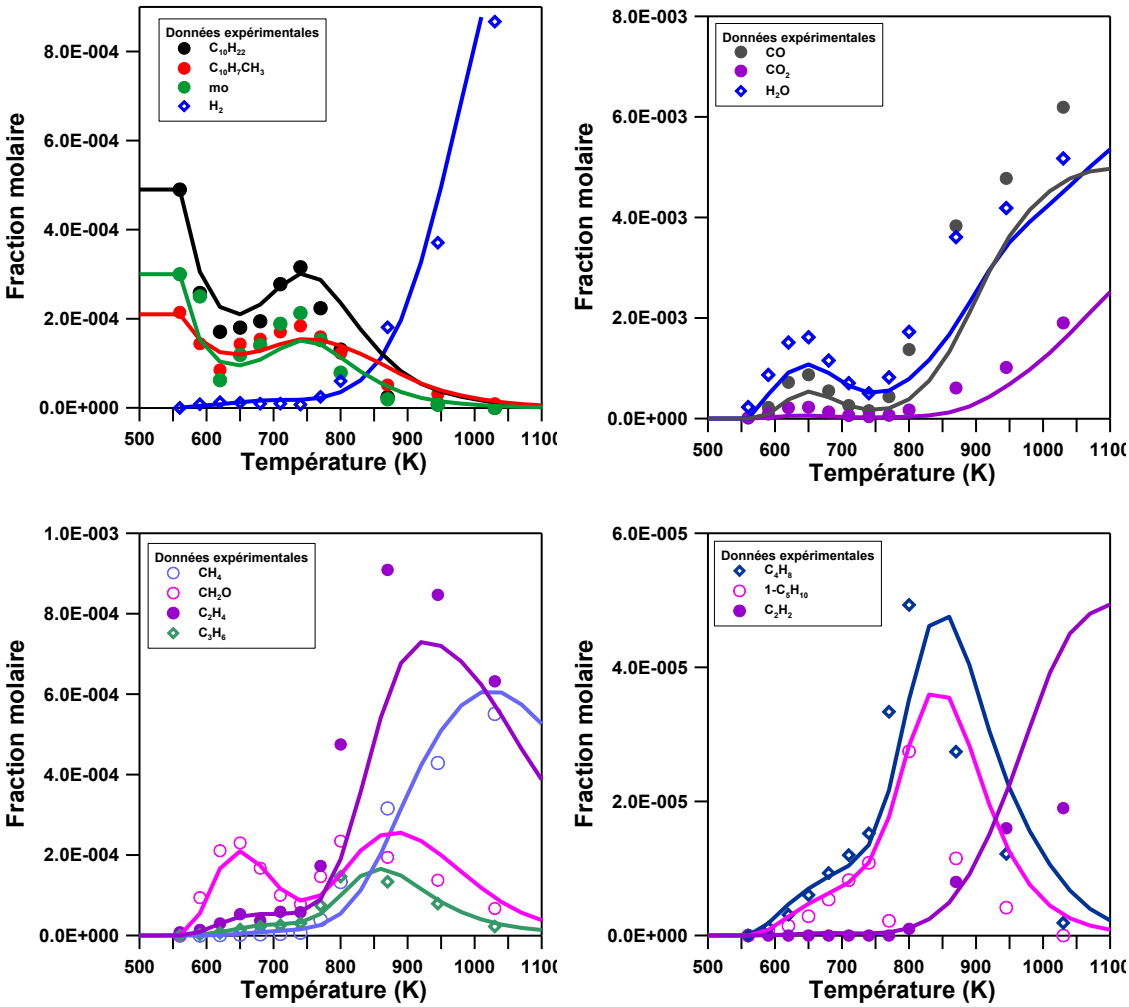


Figure 73. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar; φ=1,5 et τ=1s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

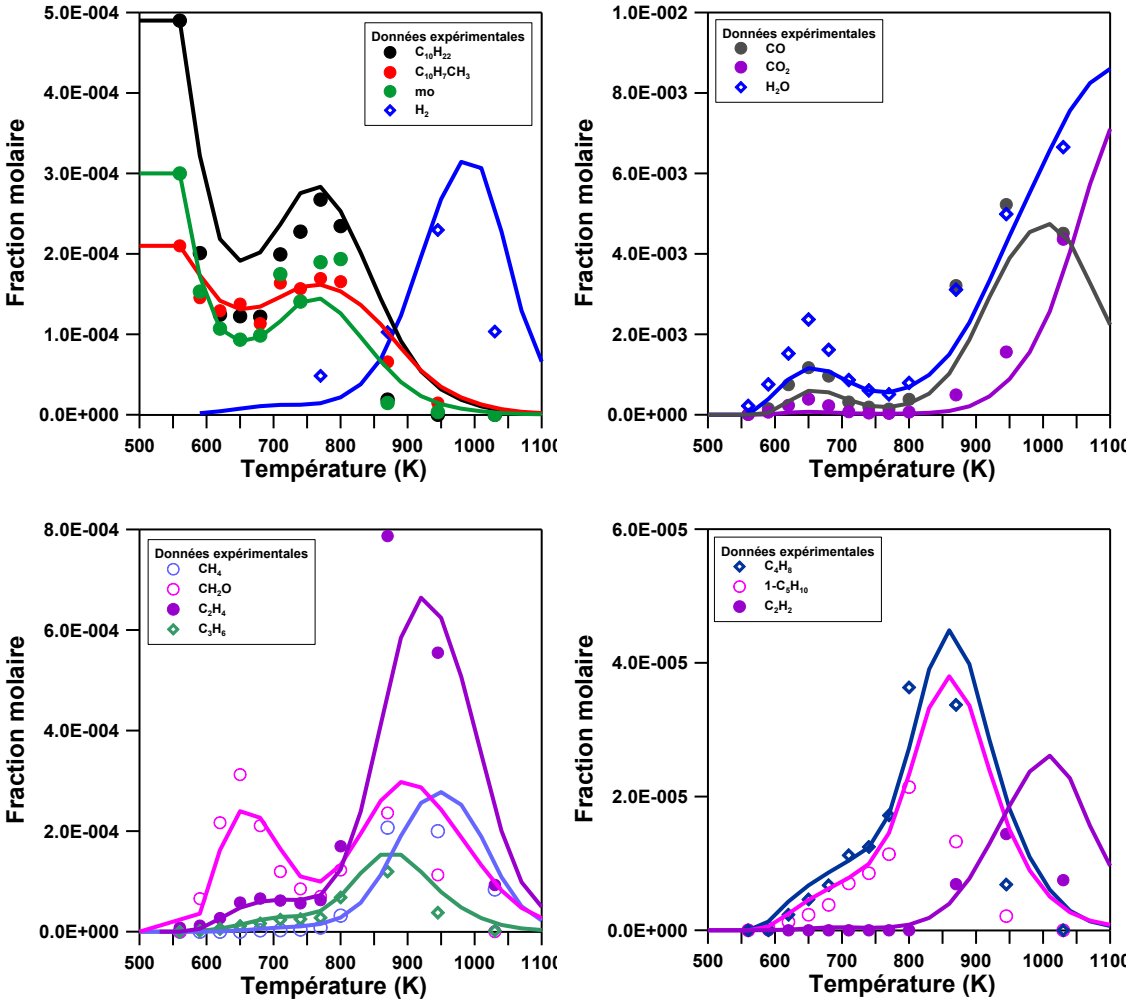


Figure 74. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 6 bar; φ=0,5 et τ=0,6s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

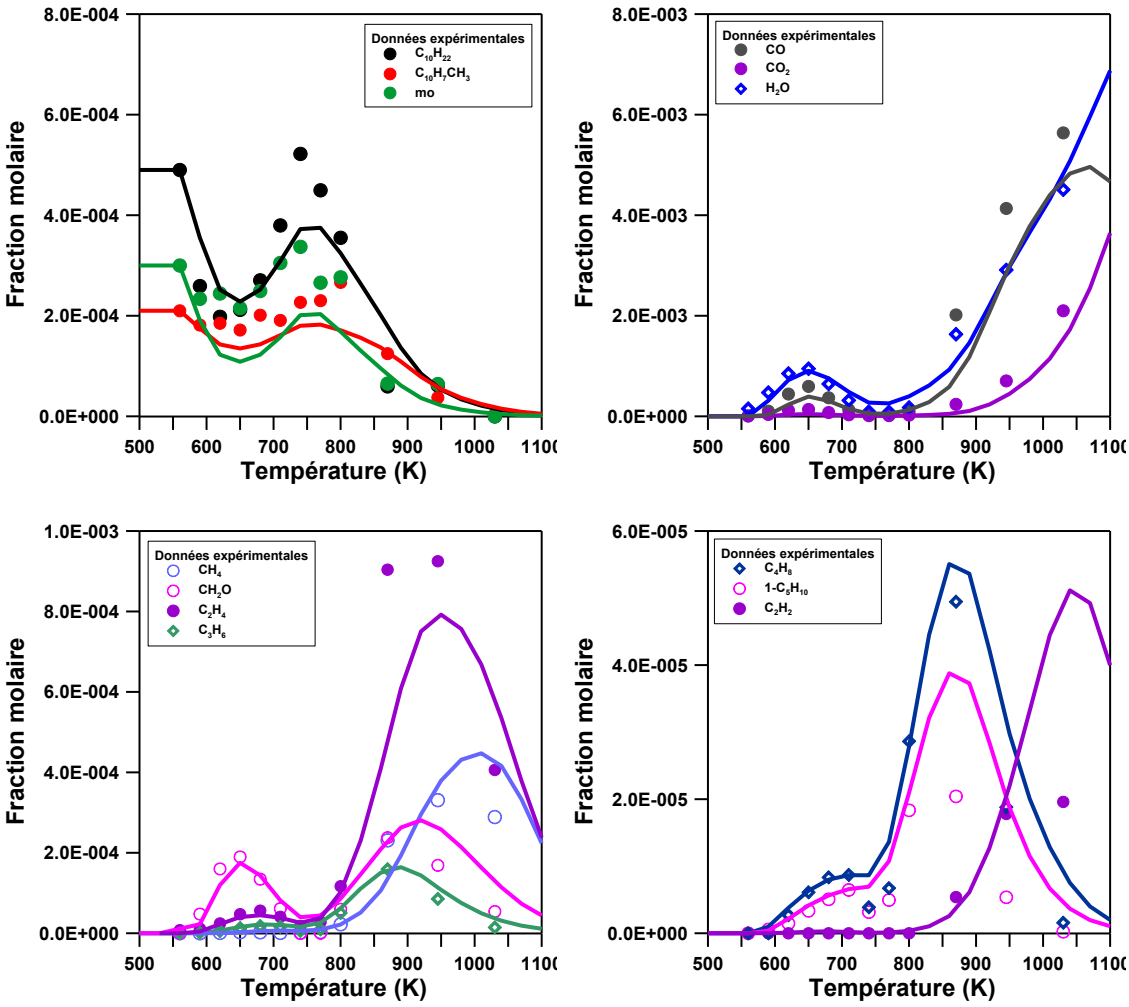


Figure 75. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 6 bar; φ=1 et τ=0,6s). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.

b) Analyse de sensibilité

On a tenté de déterminer les réactions les plus influentes pour la modélisation. Pour cela, une analyse de sensibilité a été menée pour l'oxydation du carburant modèle B30 en mélange pauvre (φ=0.5). Les résultats sont présentés sur la Figure 76**.**

D'après ces analyses de sensibilité, à 620K, φ=0.5 et 10 bar, les réactions des radicaux OH sont particulièrement influentes ; on notera en particulier les sensibilités élevées pour les réactions suivantes :

$$nC_{10}H_{22} + OH \rightleftarrows C_{10}H_{21} + H_2O$$
$$MO + OH \rightleftarrows C_9H_{17}O_2 + H_2O$$
$$C_{10}H_7CH_3 + OH \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + H_2O$$

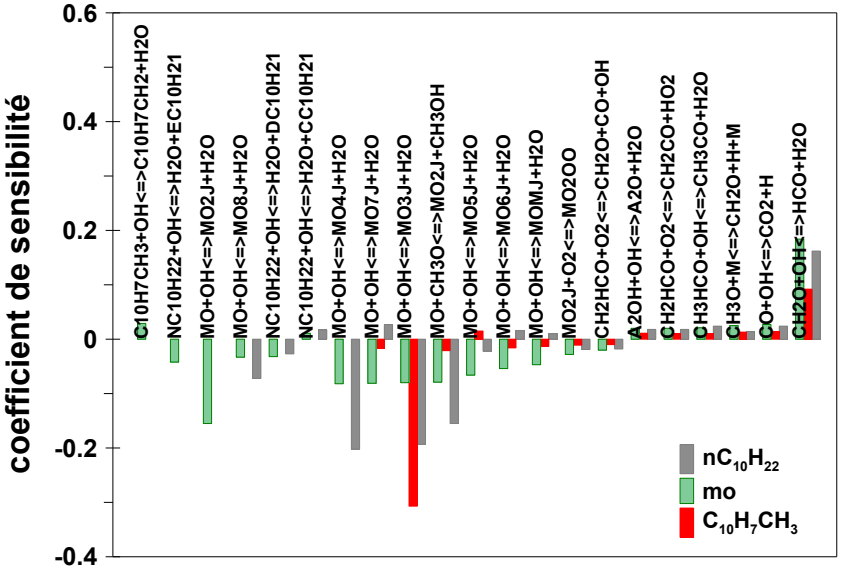


Figure 76. Coefficients de sensibilité pour le *n*-décane, l'octanoate de méthyle, et le 1-méthylnaphtalène lors de l'oxydation du carburant modèle type B30 en JSR a 10 bar et φ=0,5 et 620K.

c) Analyse de voies réactionnelles

Après ces résultats de modélisation et les résultats de sensibilité à basse température, on a mené une analyse de voies réactionnelles afin de déterminer les chemins de dégradation préférentiels des constituants initiaux du carburant.

A 620K, φ=0.5 et 10 bar, les réactions des radicaux OH sont particulièrement importantes :

$$nC_{10}H_{22} + OH \rightleftarrows C_{10}H_{21} + H_2O$$
$$MO + OH \rightleftarrows C_9H_{17}O_2 + H_2O$$
$$C_{10}H_7CH_3 + OH \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2 + H_2O$$

Ces réactions génèrent principalement les radicaux décyles, moXj (radicaux issues de la décomposition de l'octanoate de méthyle) et du méthylnaphtyle. Dans ces conditions, les radicaux OH sont principalement formés à partir de la décomposition des alkylhydroperoxide et céto hydropéroxydes (O_2QOOH et OQ'OOH) dérivés de l'oxydation du *n*-décane et du méthyle octanoate. Lorsque les processus d'oxydation des radicaux d'alkyle sont moins importants que les réactions de β-scissions, on observe la formation d'éthylène ou de propène. En fait, le modèle indique que l'éthylène est principalement produit par la décomposition de C_2H_4OOH.

Au dessus de 750K, une transition au régime d'oxydation à haute température survient. Dans ce régime, le carburant est rapidement consommé à travers des réactions de métathèses avec l'OH, et de larges quantités de produits sont formés. De la même façon, le modèle prédit la réactivité globale du carburant ainsi que la formation des produits rencontrés lors des expériences, alors que ce modèle semble sous-estimer le taux global d'oxydation au delà de 800K. Ce comportement provient d'un fort effet inhibiteur du 1-methylnaphtalène sur l'oxydation du *n*-décane et du méthyle octanoate qui pourrait être due au manque des réactions croisées dans le modèle.

Les voies de décomposition du carburant modèle B30 à 1030K, 10 bar et φ=1 sont indiquées sur la Figure 77. On peut voir que dans ces conditions, le *n*-décane est consommé principalement dans un premier temps par les réactions avec le radicaux OH, O et H pour former les radicaux décyles (80%) via :

$$nC_{10}H_{22}+OH \rightleftarrows H_2O + C_{10}H_{21}$$
$$nC_{10}H_{22}+H \rightleftarrows H_2 + C_{10}H_{21}$$
$$nC_{10}H_{22}+O \rightleftarrows OH + C_{10}H_{21}$$

En parallèle, le 1-méthylnaphthalène et l'octanoate de méthyle sont consommés également dans un premier temps par les réactions avec les radicaux OH et H pour former des radicaux $C_{10}H_7CH_2$ (81%) et moXj (63%) via :

$$C_{10}H_7CH_3+OH \rightleftarrows H_2O + C_{10}H_7CH_2$$
$$C_{10}H_7CH_3+H \rightleftarrows H_2 + C_{10}H_7CH_2$$
$$mo+O \rightleftarrows OH + moXj$$
$$mo+H \rightleftarrows H_2+moXj$$

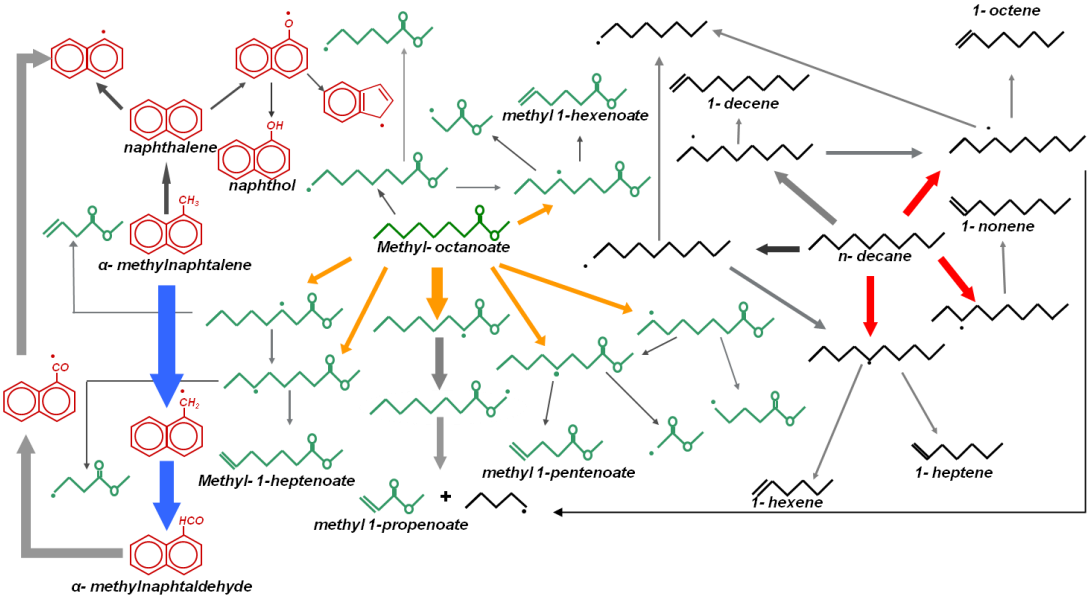


Figure 77. Principales voies de dégradation du carburant modèle type B30 (49/21/30 *n*-décane/1-méthylnaphtalène/octanoate de méthyle en mole) : P=10 bar , φ=1 and T=1030K.

Par la suite ces radicaux sont oxydés pour former des décènes, des esters méthyliques insaturés de courte chaîne carbonée. Dans le cas du 1-méthylnaphtalène on a formation d'aldéhydes ($C_{10}H_7CHO$). Ces radicaux, dans le cas d'oxydation du *n*-décane et de l'octanoate de méthyle réagissent à nouveau pour former au fur et à mesure des composés de chaîne carbonée plus courte. A cette température la fixation d'oxygène pour la formation des péroxydes est très faible et l'analyse réactionnelle ne peut pas les quantifier. Pour le cas du 1-méthylnaphtalène, la formation des espèces en équilibre se poursuit jusqu'à la rupture des noyaux aromatiques.

Conclusion

La cinétique d'oxydation d'un gazole commercial, d'un B30 réel et de carburants modèles de type gazole (70% mol n-decane/30% mol 1-méthylnaphtalène) et de type B30 (49% mol *n*-decane/21% mol 1-méthylnaphtalène/30% mol d'octanoate de méthyle) a été étudiée dans des conditions diluées (10 300 ppm de C) en utilisant un JSR dans une large gamme de conditions (560-1030 K, 6 et 10 bar, et pour des richesses comprises entre 0,25 et 1,5). Ces expériences ont donné comme résultat des profils de concentration d'espèces stables obtenues pour un temps de passage moyen constant et pour une température variable. Les résultats ont montré que les carburants modèles s'oxydent de manière très similaire aux carburants réels qu'ils représentent. Le développement ainsi qu'une première validation d'un schéma cinétique d'oxydation pour les carburants de type gazole/bio-Diesel a été réalisé en utilisant ces résultats. Ce premier modèle d'oxydation est composé de 7748 réactions et 1964 espèces. Les résultats de la simulation cinétique en PSR ont montré une bonne concordance entre les données expérimentales et les prédictions.

Des données expérimentales complémentaires portant sur l'auto-inflammation des carburants modèles déjà considérés ici, ainsi que les modélisations cinétiques associées, seront présentées dans le chapitre suivant.

Chapitre 4

Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de carburants modèles en tube à choc

Après le développement et la validation du schéma cinétique d'oxydation des carburants modèles de type gazole et B30 en JSR, une deuxième phase de validation a été menée en tube à choc, avec l'objectif d'étendre le domaine de validation du schéma cinétique proposé.

On a mesuré ainsi les délais d'auto-inflammation du carburant modèle B30 (composé de 70%$_{mol}$ de IDEA-fuel plus 30%$_{mol}$ d'octanoate de méthyle) dans une large gamme de conditions expérimentales : 20 et 40 bar, φ 0,5 à 1,5, et 700 et 1200 K. Le mécanisme a été également confronté à des résultats expérimentaux en tube à choc obtenus par Wang *et al.* 2010, pour un carburant modèle type gazole ou IDEA-fuel composé par 70% de *n*-décane et 30% 1-méthylnaphtalène.

Comme au chapitre précédent, des réactions d'interaction entre les trois composants de carburant et ses premiers radicaux, ainsi que des réactions d'oxydation pour le 1-méthylnaphtalène proposées dans la littérature, ont été introduites dans le modèle afin d'améliorer les prédictions des délais d'auto-inflammation à basse température. Le nouveau modèle est constitué de 7866 réactions réversibles et de 1975 espèces. Ce nouveau schéma proposé, améliore non seulement les prédictions des profils de concentration des composés mesurés précédemment en JSR, mais représente raisonnablement les données expérimentales d'auto-inflammation obtenues ici. Afin de mieux comprendre ces résultats, des analyses de sensibilité et de voies réactionnelles ont été menées.

4.1 Le tube à choc

4.1.1 Principe de fonctionnement d'un tube à choc

Un tube à choc est un dispositif expérimental largement utilisé dans le domaine de l'aérodynamique, la physique et la chimie. Ce dispositif permet de porter quasi-instantanément un mélange gazeux à haute température et à haute pression de façon homogène et adiabatique. Ainsi, le phénomène transitoire survient lorsque l'onde est propagée, à travers le mélange gazeux étudiée, à haute vitesse.

Un tube à choc est constitué d'un long réacteur tubulaire divisé en deux parties séparées par une fine membrane. Une partie à basse pression remplie du mélange

gazeux carburant/air, et une partie à haute pression où des gaz inertes sont introduits. Ces gaz inertes sont maintenus dans la chambre à haute pression jusqu'à la rupture brutale du diaphragme qui sépare les deux sections. Cette rupture provoque l'expansion des gaz inertes à haute pression vers la partie à basse pression et une onde de choc supersonique qui se propage vers le mélange d'essai. Le déplacement de cette onde de choc induit une augmentation de la température et de la pression du milieu où elle se propage et on parle alors de gaz choqués. En même temps, des ondes de détentes se propagent vers la partie à haute pression créant un abaissement de la température et de la pression. Le délai d'observation est ainsi limité par la durée s'écoulant entre la réflexion de l'onde de choc au fond du tube et sa rencontre avec la surface de contact Δt_{ms}. Un schéma de principe du tube à choc, en indiquant la distribution longitudinale du temps-pression est présenté sur la Figure 78.

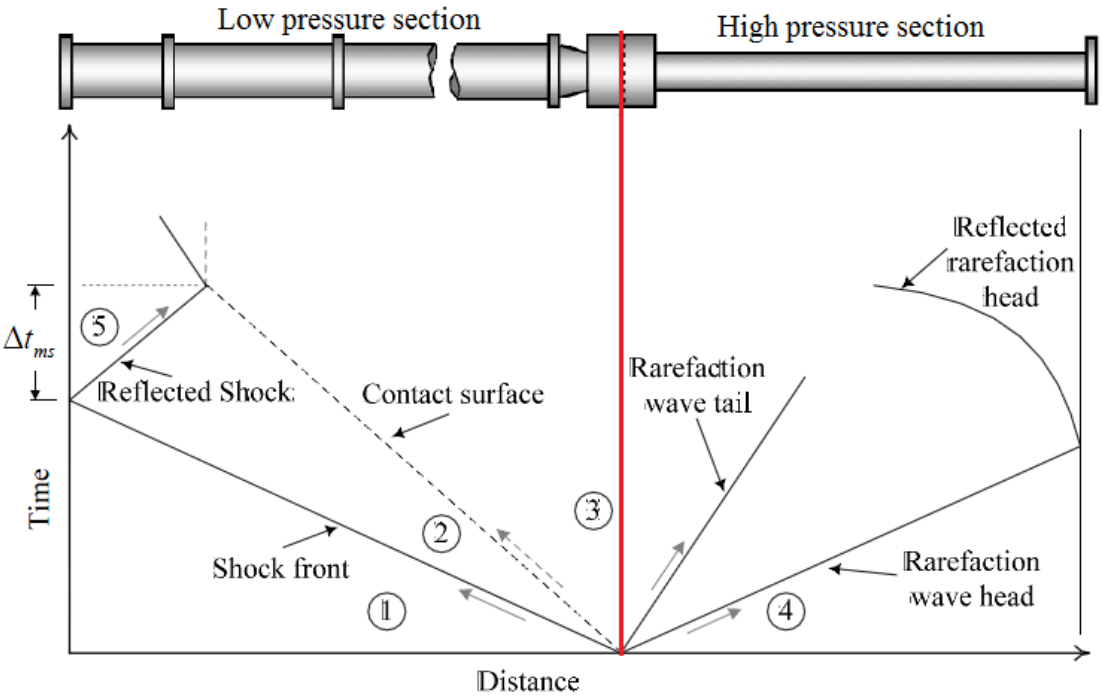


Figure 78. Schéma de principe temps - distance pour un tube à choc. Zone 1- mélange de gazeux d'essai, zone 2- gaz choqués (onde de choc incidente), zone 3- gaz inertes en expansion, zone 4- gaz inertes comprimés, zone 5- gaz choqués (onde de choc réfléchie).

La pression axiale et les distributions de température avant et après l'éclatement de la membrane sont représentées schématiquement sur la Figure 79. Sur cette figure on peut observer les distributions axiales de la pression et de la température à (a) t = 0, à deux temps intermédiaires (b) et (c) montrant les distributions de P et T avant l'arrivée de l'onde de choc incidente à la paroi du fond, et enfin, (d) et (e) montrant la distribution axiale de P et T après que l'onde réfléchie ait atteint l'échantillon de gaz. Sur la Figure 79, on peut également observer que les ondes de choc incidente et réfléchie provoquent deux paliers de température et de pression dans le gaz d'essai.

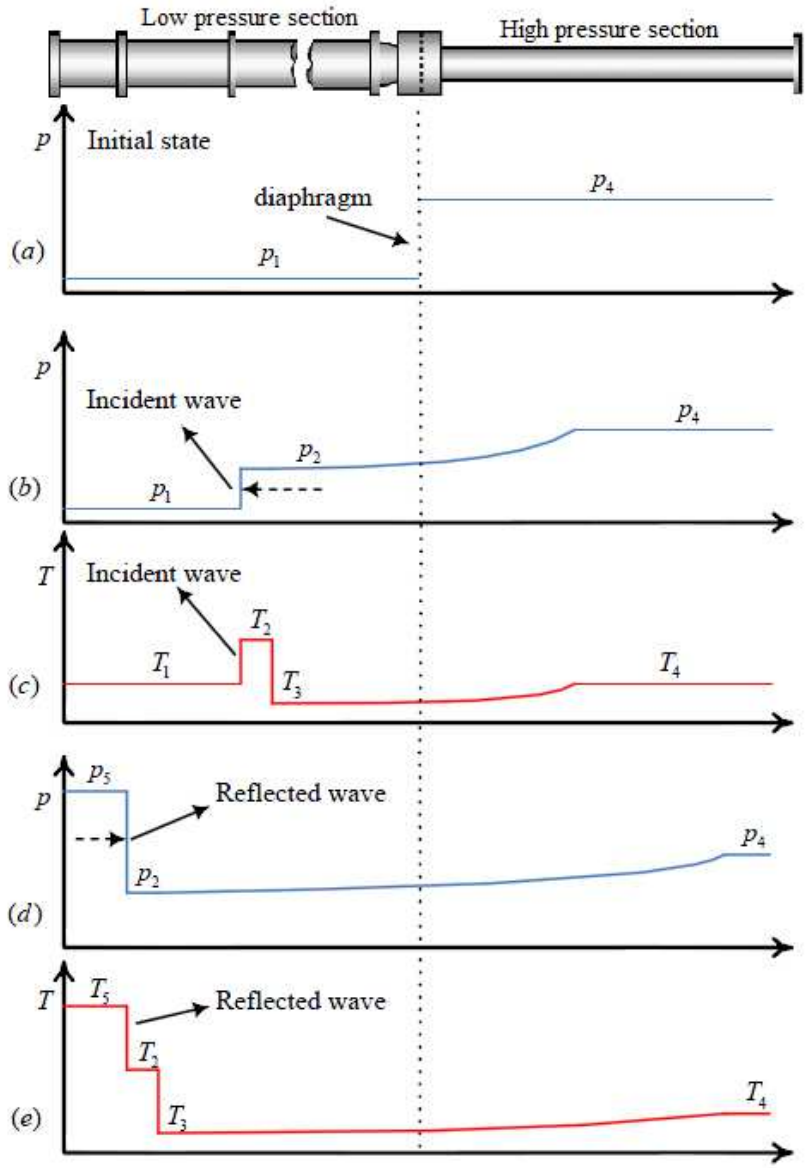


Figure 79. Fonctionnement d'un tube à choc, (a) état initial, (b) et (c) Propagation de l'onde de choc incidente, (d) et (e) propagation de l'onde de choc réfléchie (source : Cancino et al. 2009)

4.1.2 Théorie de l'onde de choc- Physique de l'onde de choc

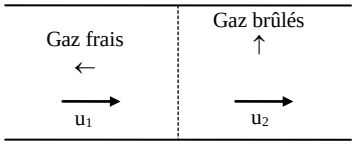
Une onde de choc est une discontinuité en température et en pression d'une épaisseur de quelques libres parcours moyens et qui se déplace à une vitesse supersonique.

Le calcul des paramètres de choc derrière l'onde de choc se fait par résolution des équations de conservation, après avoir fait les hypothèses suivantes :

- l'onde plane se propage à vitesse constante dans un tube à section constante,
- les transferts d'énergie aux parois sont négligeables,
- le front de l'onde de choc est une zone de discontinuité,

- les gaz sont parfaits, non visqueux et non conducteurs, à coefficient isentropique indépendant de la température.

On pose :
ρ_i : masse volumique des gaz dans l'état i
ρ_{ij} : rapport des masses volumiques des gaz dans les états i et j
u_i : vitesse des gaz par rapport à l'onde de choc dans l'état i
h_i : enthalpie des gaz dans l'état i
C_P : capacité calorifique à pression constante
H_i : enthalpie molaire dans l'état i
H_{i0} : enthalpie molaire standard dans l'état i
M : masse molaire des gaz
P_i : pression des gaz dans l'état i
R : constante des gaz parfaits par unité de mole ($R=8{,}314\ J.mol^{-1}.K^{-1}$)
R_S : constante des gaz parfaits par unité de masse ($R_S=R/M$)
V_S : vitesse de l'onde de choc incidente par rapport au référentiel laboratoire
V_r : vitesse de l'onde de choc réfléchie par rapport au référentiel laboratoire
indice 1 : gaz frais
indice 2 : derrière l'onde de choc incidente
indice 5 : derrière l'onde de choc réfléchie
On considère le passage des gaz à travers une surface unité du front de choc :



Il y a conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie :

$$\rho_1 u_1=\rho_2 u_2 \qquad (1)$$
$$\rho_1 u_1^2+P_1=\rho_2 u_2^2+P_2 \qquad (2)$$
$$h_1+\frac{1}{2}u_1^2= h_2+\frac{1}{2}u_2^2 \qquad (3)$$

Comme les gaz sont supposés parfaits :

$$P_1=\rho_1 R_S T_1 \qquad (4)$$
$$P_2=\rho_2 R_S T_2 \qquad (5)$$

a) Calcul des paramètres derrière l'onde de choc incidente :

En combinant les équations (1) à (5), on obtient l'équation de Hugoniot :

$$h_2-h_1=\frac{1}{2}(P_2-P_1)\left(\frac{1}{\rho_1}+\frac{1}{\rho_2}\right) \qquad (6)$$

Une onde de choc peut se propager dans un tube rempli d'un gaz non réactif à vitesse sensiblement constante. S'il s'agit d'un gaz rare, tel que l'hélium, C_P est indépendante de T :

$$h=C_PT \text{ et } \gamma = \frac{C_P}{C_V} = \frac{C_P}{(C_P - R)}$$

$$\text{d'où } h = \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{P}{\rho} \qquad (7)$$

En substituant (7) dans l'équation (3), et en éliminant u_1 et u_2 grâce aux équations (1) et (2), on obtient :

$$\frac{\rho_1 P_2 - \rho_2 P_1}{\rho_2 P_2 - \rho_1 P_1} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \qquad (8)$$

De (8), on déduit :

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{1 - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\frac{\rho_1}{\rho_2}}{\frac{\rho_1}{\rho_2} - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}} \quad (9) \text{ et } \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} + \frac{P_2}{P_1}}{\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\frac{P_2}{P_1} + 1} \qquad (10)$$

On définit les nombres de Mach M_1 et M_2 :

$$M_1 = \frac{u_1}{a_1} \text{ et } M_2 = \frac{u_2}{a_2} \text{ avec } a^2=\gamma R_S T$$

D'où :

$$\boxed{\frac{P_2}{P_1} = \frac{2\gamma M_1^{\,2} - (\gamma - 1)}{\gamma + 1}} \quad (11)$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(\gamma + 1)M_1^{\,2}}{(\gamma - 1)M_1^{\,2} + 2} \qquad (12)$$

D'après la loi des gaz parfaits et les équations (11) et (12), on obtient :

$$\boxed{\frac{T_2}{T_1} = \frac{\left(\gamma M_1^{\,2} - \frac{\gamma - 1}{2}\right)\left(\frac{\gamma - 1}{2}M_1^{\,2} + 1\right)}{\frac{(\gamma - 1)^2}{4}M_1^{\,2}}}$$

Il suffit donc de mesurer la célérité de l'onde pour déterminer l'état des gaz derrière le choc incident se propageant dans un gaz inerte, dont l'état initial est connu.

b) Calcul des paramètres derrière l'onde de choc réfléchie

Les équations de conservation peuvent être appliquées au choc réfléchi. Dans ce cas, la pression et la température sont environ deux fois plus élevées que derrière l'onde incidente. Le gaz peut être ainsi porté à des températures excédant 10000 K,

mais dans ce cas, les gaz sont partiellement ionisés et il faut en tenir compte dans les équations de conservation.

Dans le cas d'une onde de choc réfléchie, en faisant les mêmes hypothèses, on aboutit aux relations suivantes :

$$\frac{P_5}{P_1} = \frac{\frac{\gamma+1}{\gamma-1} - \frac{P_1}{P_2} + 2}{1 + \frac{(\gamma+1)}{(\gamma-1)}\frac{P_1}{P_2}}$$

$$\frac{T_5}{T_1} = \frac{P_5}{P_2}\left[\frac{\frac{(\gamma+1)}{(\gamma-1)} + \frac{P_5}{P_2}}{1 + \frac{(\gamma+1)}{(\gamma-1)}\frac{P_5}{P_2}}\right]$$

Il ressort de ces équations que pour connaître les différents paramètres des gaz derrière l'onde de choc incidente et derrière l'onde de choc réfléchie, il suffit de connaître la pression, la température, la masse volumique du gaz étudié à l'instant initial ainsi que la vitesse de l'onde de choc incidente.

Ces équations ne sont rigoureusement valables que pour un gaz calorifiquement parfait, car le coefficient isentropique est considéré constant.

4.1.3 Description du tube à choc avec système de chauffage du laboratoire IVG

Les expériences ont été réalisées dans le tube à choc à haute pression du laboratoire IVG de l'Université de Duisburg. Ce tube est chauffé à 130°C, il est identique à celui employé par Schulz et ses collaborateurs (Herzler *et al.* 2007; Fikri *et al.* 2008; Cancino *et al.* 2009; Hartmann *et al.* 2009).

Le tube à choc a un diamètre intérieur de 90mm, une section à haute pression de 6,1m et une section à basse pression de 6,4m. Les sections à haute et basse pression sont séparées par un diaphragme en aluminium. L'épaisseur des membranes utilisées varie entre 2 et 4 mm selon les pressions P_5 désirées. La Figure 80 présente une vue schématique de ce tube à choc.

L'installation est équipée d'un système de pompage permettant d'atteindre des pressions en dessous de 10^{-2} mbar entre les expériences, et de trois détecteurs de pression piézoélectriques permettant de déterminer la vitesse d'onde de choc.

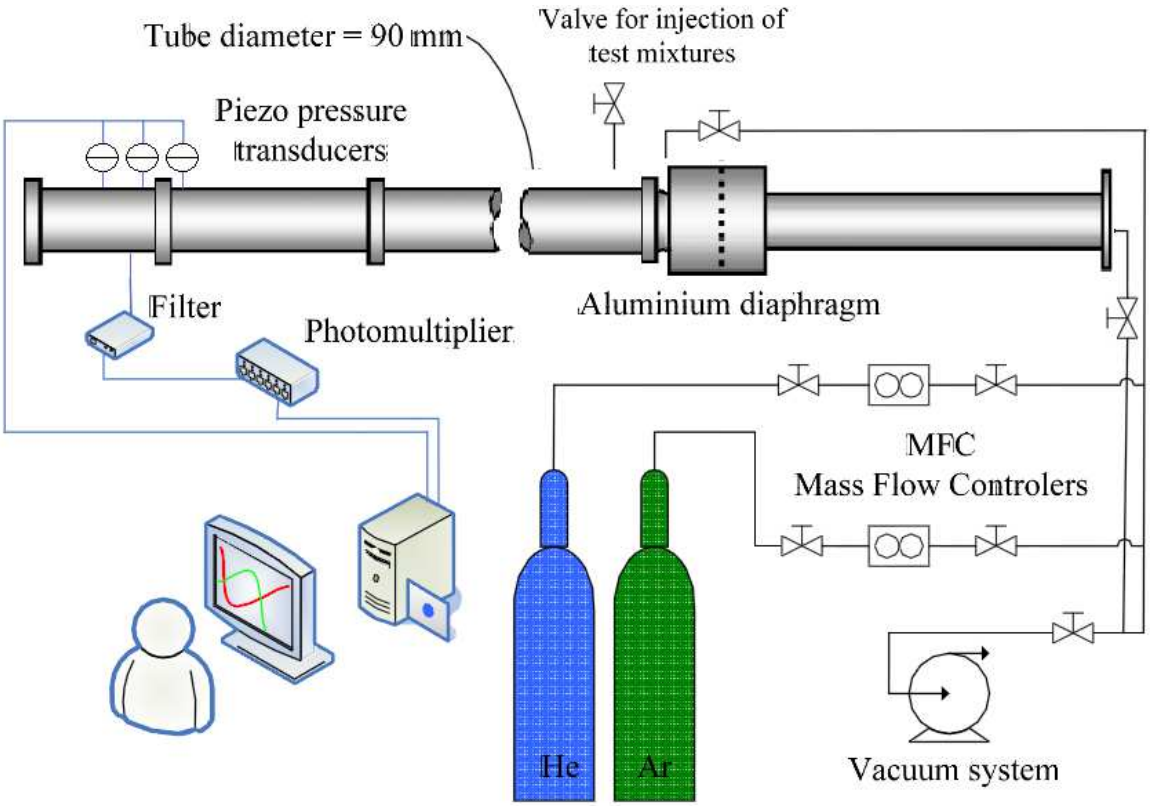


Figure 80. Schéma représentatif du tube à choc chauffé du laboratoire IVG – UDE (Allemagne).

4.2 Méthodologie

4.2.1 Incertitudes liées aux expériences en tube à choc

Il y a plusieurs incertitudes associées aux mesures du délai d'auto-inflammation en tube à choc. Les erreurs systématiques sont liées à la pression partielle mesurée lors de la préparation des mélanges, la formation de la couche limite et l'accès optique du capteur de chimiluminescence dans la zone de mesure. Par la suite, les conditions de l'onde de choc réfléchie ont été déterminées à partir de relations standard de chocs unidimensionnels et de la base de données thermodynamiques utilisant le package Shock de CHEMKIN du laboratoire IVG. Ainsi, les incertitudes calculées sont de l'ordre de ± 0,3% pour la vitesse de l'onde du choc incidente et pour T_5 d'environ ± 7 K. De la même façon, les variations dans les calculs du délai d'auto-inflammation sont d'environ ± 7,5%, proches des incertitudes expérimentales (température et délai d'auto-inflammation), citées dans la littérature pour des expériences similaires en tube à choc (Davidson *et al.* 2002; Vasudevan *et al.* 2005; Dean *et al.* 2007; Davidson *et al.* 2000). Enfin, pour cette étude, les incertitudes sur les délais d'auto-inflammation sont les mêmes que celles déterminées par Cancino *et al.* 2009, c'est-à-dire ± 7,5% à ± 10%.

4.2.2 Préparation du mélange et injection dans la section à basse pression

Comme pour l'étude en JSR, les composés hydrocarbonés de haute pureté, utilisés dans ces études, ont été achetés chez Aldrich : le *n*-décane avait une pureté >99%, le 1-méthylnaphthalène avait une pureté >95%, et l'octanoate de méthyle avait une pureté de 99%. Les mélanges gazeux carburant/air ont été préparés à 130°C dans un réservoir en acier inoxydable avant de les introduire dans la section à basse pression. Les pressions du carburant et de l'air synthétique évaporés (79,5% N_2 et 20,5% O_2) ont été contrôlées manométriquement pour garantir la richesse désirée.

Les gaz inertes ont été mélangés *in situ* en utilisant deux contrôleurs de débit massique à haute pression (Bronkhorst Hi-Tec flow meter F-136AI-FZD-55-V et F-123MI-FZD-55-V). L'hélium (He) a été utilisé comme composant principal et l'argon (Ar) a été ajouté pour atteindre l'impédance acoustique du gaz d'essai. La composition requise du gaz inerte a été calculée en utilisant les équations définies par Oertel *et al.* 1966 et Palmer *et al.* 1961. Les concentrations d'argon dans l'hélium étaient de 5 à 20%, ce qui était suffisant pour générer des ondes de choc sur mesure. La température et la pression derrière l'onde de choc réfléchie ont été calculées à partir des vitesses incidentes de choc et de l'atténuation en utilisant un modèle de tube à choc à une dimension −code Shock du logiciel CHEMKIN− (Figure 81).

Renault_Mixture_B -- Data for P5 = 20 bar -- ø =1.0

Experiment	P1A (mbar)	P2 (atm)	T2 (K)	T5 (K)	V (m/s)	Vol Argon (m^3n/h)	Vol Helium (m^3n/h)
V	340.03	3.63	947.55	1500	1166.4	7.09	200.0
V	563.79	4.29	796.40	1200	989.3	16.40	200.0
V	697.66	4.62	746.05	1100	925.2	20.00	189.0
V	784.91	4.82	720.95	1050	892.0	20.00	167.0
V	1022.55	5.32	670.88	950	823.1	20.00	129.0
V	1397.60	6.01	621.15	850	750.7	20.00	98.8
V							
V							

Shock tube heating system: 403.15 K - (130 °C)

Mixture:	**** Renault_Mixture_B_20_1.0 ****	Partial pressure [mbar]	Vol - liq [mL]	
n-Decane	P v = 283.06 mbar, @ 403.15 K	42.90	28.44	Fuel einfüllen auf [mbar]
Methyl octanoate	P v = 144.08 mbar, @ 403.15 K	26.26	16.12	
a methyl naphtha	P v = 34.6 mbar, @ 403.15 K	18.39	8.72	
sel pressure (m	6000.00	Total Vol Liq [mL]	53.278	87.561

Helena, 06.09.2010 - IVG - UDE

Figure 81. Exemple d'un tableau caractéristique pour des expériences en tube à choc

4.2.3 Calculs du délai d'auto-inflammation

Les expériences ont été effectuées pour une température de choc réfléchi dans un intervalle de 700 < T_5 < 1200 K, avec un temps de résolution de 0.1 µs, à deux pressions de choc post-refléchi (P_5) différentes (20 et 40 bar). L'allumage a été observé en mesurant les changements d'intensité chimiluminescence de CH* à 431,5 nm avec un photomultiplicateur positionné à 15mm en amont de la bride.

A partir des signaux enregistrés par le capteur de pression et le photomultiplicateur, il est possible de calculer le délai d'auto-inflammation. Les délais d'auto-inflammation ont été déterminés en extrapolant les augmentations abruptes du signal d'émission par rapport au niveau zéro de l'axe des temps. Ainsi, il est défini comme le temps s'écoulant entre le passage de l'onde de choc réfléchie (identifiée par le second saut de pression au niveau du capteur de pression) et le point où la droite tangente au signal de radicaux CH* croise le niveau zéro de l'axe des temps, comme le montre la Figure 82.

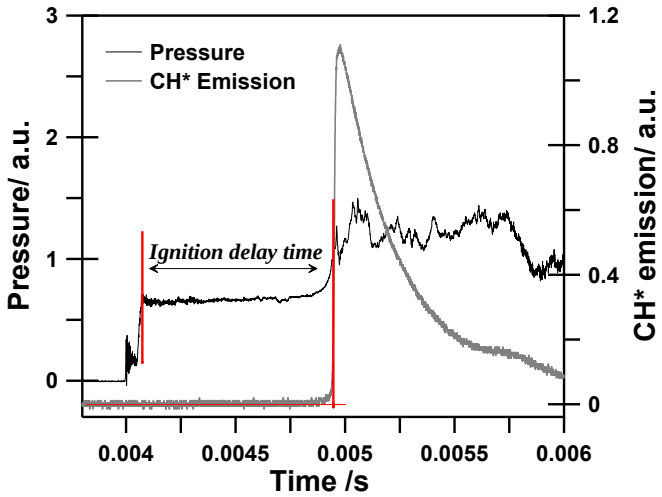


Figure 82. Profils de signaux de pression et d'émission de CH* déterminant le délai d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 dans l'air à 40 bar, 916 K and φ= 1.0.

4.3 Résultats expérimentaux

Dans la littérature, peu d'études en tube à choc ont été menées avec des carburants modèles composés de trois espèces de poids moléculaires élevés, et en particulier des esters méthyliques, espèces représentatives des bio-Diesel.

Ici, les délais d'auto-inflammation ont été mesurés par la technique du tube à choc en utilisant l'émission des radicaux CH* dans le but d'étendre les bases de données expérimentales permettant la validation d'un modèle cinétique détaillé pour l'oxydation des carburants du type gazole et bio-Diesel dans tous les domaines de température.

4.3.1 Etude des délais d'auto-inflammation du carburant modèle type B30 dans l'air.

a) Conditions expérimentales

Les conditions sont récapitulées dans le Tableau 27.

Tableau 27. Récapitulatif des conditions expérimentales pour l'étude en tube à choc sur l'oxydation du carburant modèle B30.

T (K)	*P (bar)*	*Composition du carburant modèle*	*φ*
750 à1500	20 et 40	70% $_{mol}$ (70% n-decane/30%AMN) /30%$_{mol}$ MO	0,5 à1,5

b) Résultats expérimentaux

Les résultats expérimentaux sont présentés dans le Tableau 28.

Tableau 28. Résultats des délais d'auto-inflammation du carburant modèle B30 dans l'air à φ=0,5, φ=1,0 and φ=1,5.

***φ*=0,5**			***φ*=1,0**		
***T* (K)**	***p*(bar)**	***τ* (µs)**	***T* (K)**	***p*(bar)**	***τ* (µs)**
1483	19.6	–	809	17.4	1626
1198	19.9	231	768	21.4	1312
1078	19.0	812			
1048	19.9	802	1456	54.0	–
939	19.5	2856	1275	46.2	–
920	18.4	3119	1210	50.0	23
889	20.6	2486	1131	43.0	63
884	19.4	2564	1034	38.5	210
865	21.0	2536	965	41.8	434
790	21.6	2205	928	37.6	395
769	21.4	2592	915	40.6	435
			882	40.2	458
1215	41.3	112	843	35.3	394
1178	47.1	229	814	31.8	792
1113	46.2	79	811	31.5	793
1067	37.1	317	768	21.4	40
1019	42.9	392			
1000	35.4	781			
977	33.3	1081	***φ*=1,5**		
957	40.8	781	***T* (K)**	***p*(bar)**	***τ* (µs)**
940	34.6	1328	1284	19.5	37
916	36.3	874	1186	19.4	160
857	37.2	931	1086	19.3	349
840	38.6	876	1013	18.2	797
785	43.3	1114	1004	18.0	735
			933	19.0	1392
			919	20.1	1741
			857	18.6	856
***φ*=1,0**			835	19.0	883
1202	20.0	126	789	21.5	1189
1154	18.2	197	750	20.0	1631
1077	19.0	493			
1053	20.2	497			
1027	18.9	738	1145	45.0	–
964	15.9	1695	978	33.0	302
938	19.3	1769	975	28.9	482
840	19.4	1356	889	37.4	433
827	18.5	1429	788	41.2	347

Avec toutes les données expérimentales obtenues en tube à choc (Tableau 28) à des températures de plus de 919K, une corrélation d'Arrhenius a été développée pour chaque richesse. Les délais d'auto-inflammation en dessous de cette température n'ont pas été pris en compte car le régime NTC est observé, et la corrélation d'Arrhenius ne peut pas être appliquée (Figure 83).

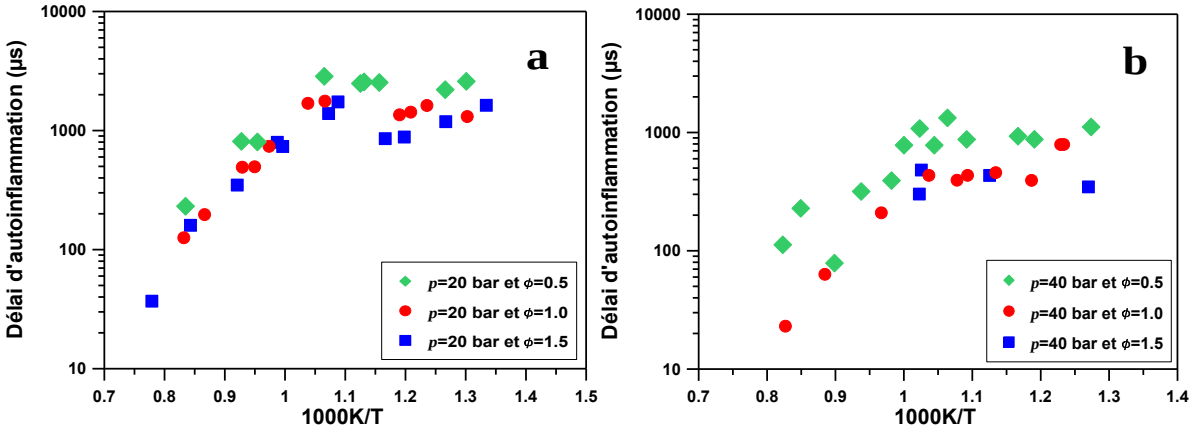


Figure 83. Résultats expérimentaux obtenus en tube à choc pour un carburant modèle B30. On peut noter le régime NTC au-delà de 919K : φ=0,5 (losanges), φ=1,0 (cercles) et φ=1.5 (carrés), à 20 bar (a) et 40 bar (b).

Chacune des corrélations établit une relation entre le délai d'auto-inflammation, la température et la pression du mélange carburant/air. Ainsi, la normalisation révèle que les délais d'auto-inflammation à richesse fixe suivent la relation :

$$\tau_{ign} = A\exp\left(B/T\right)p^{-x}$$

où

τ_{ign} est le temps de délai d'auto-inflammation en µs,
p est la pression en bar,
T est la température en K,
x est l'exposant de pression, et
A et B sont des constantes empiriques.

Par conséquent, l'utilisation de régressions multi-linéaires à l'échelle logarithmique sur l'intervalle de température (919 K < T < 1887 K) fournit les corrélations suivantes :

pour φ = 0.5 $\tau_{ign} = 3.1829 \times \exp\left(9021.2\ \mathrm{K}/T\right)\left(p/\mathrm{bar}\right)^{-1.008}$,

pour φ = 1.0 $\tau_{ign} = 0.8363 \times \exp\left(11880.8\ \mathrm{K}/T\right)\left(p/\mathrm{bar}\right)^{-1.639}$ et

pour φ = 1.5 $\tau_{ign} = 2.3334 \times \exp\left(11539.0\ \mathrm{K}/T\right)\left(p/\mathrm{bar}\right)^{-1.964}$.

Les Figure 84a et 84b présentent les délais d'auto-inflammation normalisés à 20 et 40 bar, respectivement, tracés en fonction de 1000K/T.

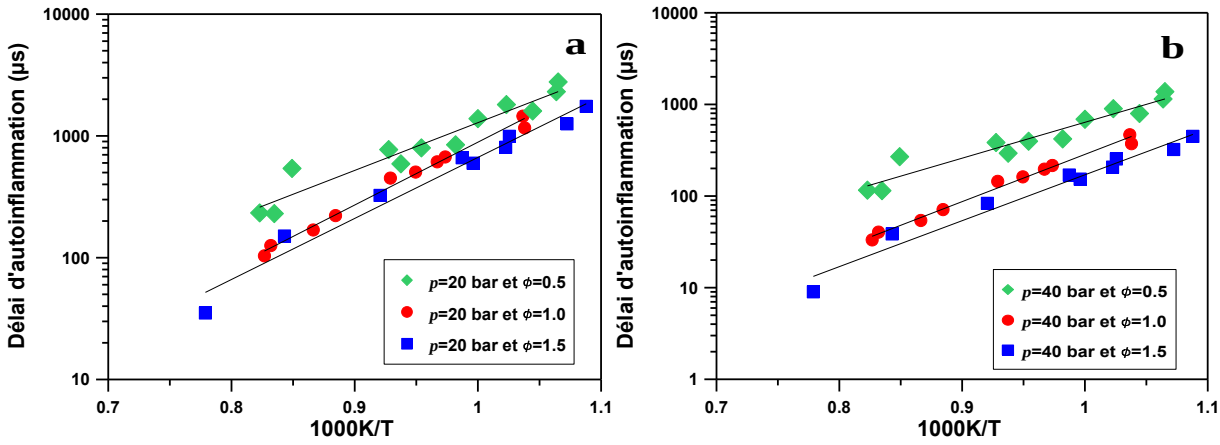


Figure 84. Délais d'auto-inflammation normalisés pour le carburant modèle B30 dans l'air à φ=0,5 (losanges), φ=1,0 (cercles) et φ=1.5 (carrés), et deux différents pressions 20 bar (a) et 40 bar (b). Les lignes correspondent aux corrélations d'Arrhenius.

c) Influence de la richesse

La Figure 84 illustre l'effet de la richesse sur les délais d'auto-inflammation à deux pressions différentes, 20 et 40 bar. Les délais d'auto-inflammation normalisés (lignes continues) sont tracés en fonction de 1000K/T. Comme on s'y attendait, les mélanges pauvres en carburant sont moins réactifs que les mélanges riches en carburant.

d) Influence de la pression

L'effet de la pression totale sur les délais d'auto-inflammation du carburant a été étudié en comparant les résultats obtenus à P_5=20 et 40 bar pour un carburant modèle type B30 (Figure 85). Sur cette figure on peut observer que les délais d'auto-inflammation, pour une même richesse, sont plus courts lorsque la pression totale augmente.

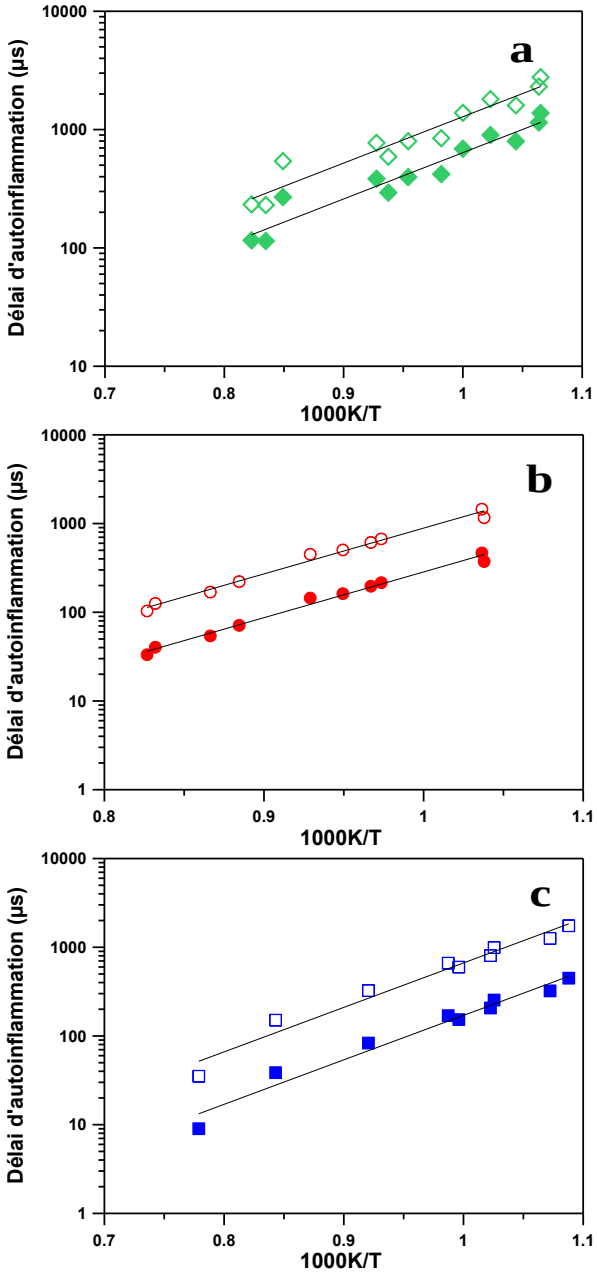


Figure 85. Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation normalisé pour le carburant modèle B30 dans l'air à φ=0,5 (a), φ=1,0 (b) et φ=1.5 (c), à deux pressions, i.e. 20 bar (symboles vides) et 40 bar (symboles pleins). Les lignes représentent les corrélations d'Arrhenius.

Wang *et al.* 2010 ont aussi observé une telle tendance pour les délais d'auto-inflammation d'un carburant modèle type gazole (30%$_{mol}$1-méthylnaphtalène/ 70% $_{mol}$ *n*-décane) sur l'intervalle de température allant de 960 à 1330K, à 40 et 20 bar. Comme le montre la Figure 86, pour une pression de 20 bar, les délais d'allumage des deux carburants modèles (B30 et gazole) sont très similaires. Cependant, à 40 bar, les délais d'auto-inflammation du carburant modèle B30 sont plus courts que ceux mesurés pour le gazole modèle. Ce comportement peut être expliqué par les liaisons alkyl-oxygène présentes dans l'octanoate de méthyle qui accélèrent l'allumage. Néanmoins, les pentes des corrélations d'Arrhenius sont très similaires, ce qui indique que les deux carburants modèles ont une énergie d'activation similaire (≈23 kcal/mole).

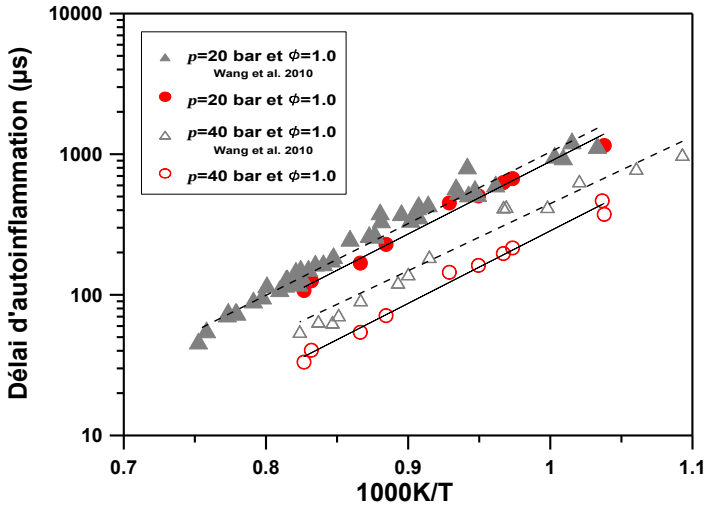


Figure 86. Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation du carburant modèle type B30-(cercles) et d'un carburant modèle type gazole (Wang *et al.* 2010, triangles) à 20 bar (symboles pleins) et à 40 bar (symboles vides). Les lignes correspondent à la corrélation d'Arrhenius.

4.4 Modélisation

Les calculs ont été effectués à l'aide du logiciel SENKIN (Lutz *et al.* 1987). Le modèle cinétique détaillé initial a été développé et validé en JSR (Chapitre 3). Ce mécanisme d'oxydation constitué de 7748 réactions réversibles et de 1964 espèces comprend des réactions de croisement. Ces dernières décrivent les interactions entre les composants du carburant ; elles ont été ajoutées pour la modélisation de l'oxydation des carburants gazoles réels et de carburant modèle.

Pour cette nouvelle validation, le mécanisme intègre de nouvelles réactions pour les espèces aromatiques issues des travaux de Narayanaswamy *et al.* 2010, et des nouvelles réactions d'intéraction sélectionnées à partir de la littérature. L'introduction de ces réactions a amélioré les simulations des profils de concentrations dans le JSR ainsi que les prédictions des délais d'auto-inflammation en tube à choc.

Une fois de plus, les réactions de croisement se sont avérées importantes pour les prédictions à basse température. Comme Andrae *et al.* 2005 et Reich *et al.* 1969 l'ont démontré, l'ajout de réactions de croisement doit être considéré quand les composants modèles sont très similaires, parce que les interactions chimiques entre les composants du carburant et leur « pool de radicaux » apparaissent pendant le processus de compression, accélérant ainsi les processus d'allumage à basse température.

4.4.1 Influence des modifications apportées

c) Réévaluation des constantes de vitesse

La première modification apportée concerne la réaction HCCO+O_2. En effet, Klippenstein *et al.* 2002 ont étudié cette réaction en 2002 et ont démontré que les

produits dominant de cette réaction sont CO_2+CO+$H^{\bullet}$, k=4,78.10^{12}.$T^{-0,42}$exp(-1150/RT).

Une autre modification concerne cette fois les vitesses de réactions de décomposition du radical naphtoxyle A_2O, ainsi que sa réaction avec un atome d'hydrogène ($H^{\bullet}$) via les réactions:

$$A_2O \rightarrow INDENYL + CO$$
$$A_2O + H^{\bullet} \rightleftharpoons A_2OH$$

Pour la réaction de décomposition, la constante de vitesse proposée par Narayanaswamy *et al.* 2010, dans son modèle d'oxydation de composés aromatiques, a été prise en compte : k=2,9.10^{10}exp (-36424/RT). Nous avons également ajusté le facteur pré-exponentiel de l'équation d'Arrhenius, pour l'addition d'hydrogène au radical naphtoxyle, en le multipliant par un facteur 1,40 : k=7,06.10^{14}. Enfin, une autre modification importante est celle apportée à la constante de vitesse de la réaction du naphtol avec le radical $OH^{\bullet}$ via :

$$A_2OH + OH \rightleftharpoons A_2O + H_2O$$

Nous avons également ajusté le facteur pré-exponentiel de l'équation d'Arrhenius en le multipliant par un facteur 3 : k=9.10^{13}.

Tableau 29. Résumé de réévaluation des constantes de vitesse [$k = AT^n \exp(-E/RT)$ en cal, mol, cm^3, s].

	Original			*Modifié*		
Réaction	*A*	*n*	*E*	*A*	*n*	*E*
$A_2O \rightarrow INDENYL + CO$	7.40E+11	0.0	43853.0	2.90E+10	0.0	36424
$A_2O + H^{\bullet} \rightleftharpoons A_2OH$	5.06E+14	0.0	0.0	7.06E+14	0.0	0.0
$A_2OH + OH \rightleftharpoons A_2O + H_2O$	3.00E+13	0.0	0.0	9.00E+13	0.0	0.0

d) Ajout de nouvelles réactions

Les réactions du benzyle, du xylène, du xylyle, du tolualdéhyde, du naphtalène, du 1-naphtylméthyle, du 1-méthylnaphtalène et de l'acénaphtylène, basées sur les mécanismes d'oxydation de composés aromatiques de Narayanaswamy *et al.* 2010, ont aussi été considérées dans notre modèle.

Les réactions du benzyle avec l'oxygène pour produire du benzaldéhyde et du phénoxy, les réactions du xylyle avec de l'oxygène pour produire du tolualdéhyde, du toluène, du méthylphényle et du benzoxy, la décomposition du xylène, et les réactions du benzaldéhyde avec H, O, OH, O_2, HO_2, et CH_3 ont été considérées. De la même façon, on a considéré les réactions de memj ($CH_3C(=O)OCH_2^{\bullet}$) et $C_9H_{19}CO$ issues du mécanisme du modèle de bio-Diesel d'Herbinet *et al.* 2010, et les réactions de

décomposition de $C_{10}H_{20}OOH$ issues du mécanisme d'oxydation du *n*-décane de Bikas *et al.* 2001. La cinétique des autres réactions introduites a été estimée par analogie avec des réactions similaires (Tableau 30). Ces réactions ont induit des changements dans les simulations principalement à haute température T>900K.

Tableau 30. Nouvelles réactions ajoutées pour des changements à haute température. [$k = A \exp T^n (-E/RT)$ en cal, mol, cm^3, s]

Réactions	*A*	*n*	*E*
$phCH_2+O_2 \rightarrow phHCO+OH$	3.760E+15	–1.55	11322
$phCH_2+O_2 \rightarrow C_6H_5O+CH_2O$	6.260E+37	–8.86	16582
$phCH_3CH_2+O \rightarrow phCH_3HCO+H$	4.370E+18	–1.34	1592
$phCH_3CH_2+O \rightarrow C_6H_4CH_3+CH_2O$	5.990E+23	–2.47	16192
$phCH_3CH_2+O \rightarrow toluene+HCO$	1.970E+22	–2.36	8152
$phCH_3CH_2+O_2 \rightarrow phCH_3HCO+OH$	1.380E+02	2.42	7440
$phCH_3CH_2+O_2 \rightarrow OC_6H_4CH_3+CH_2O$	6.570E+03	1.87	5002
$phCH_3CH_3 \rightleftharpoons C_6H_4CH_3+CH_3$	4.320E+29	–3.58	110165
$phCH_3CH_2+H \rightleftharpoons C_6H_4CH_3+CH_3$	5.830E+67	–14.15	68329
$phCH_3CH_2+HO_2 \rightarrow C_6H_4CH_3+CH_2O+OH$	3.130E+18	–1.44	13944
$phCH_3HCO \rightarrow C_6H_4CH_3+CO+H$	2.100E+16	0.00	81740
$phCH_3HCO+H \rightarrow C_6H_4CH_3+CO+H_2$	4.090E+09	1.16	2404
$phCH_3HCO+O \rightarrow C_6H_4CH_3+CO+OH$	5.840E+12	0.00	1809
$phCH_3HCO+OH \rightarrow C_6H_4CH_3+CO+H_2O$	2.890E+08	1.35	-1573
$phCH_3HCO+O_2 \rightarrow C_6H_4CH_3+CO+HO_2$	1.200E+05	2.50	37555
$phCH_3HCO+HO_2 \rightarrow C_6H_4CH_3+CO+H_2O_2$	4.090E+04	2.50	10203
$phCH_3HCO+CH_3 \rightarrow C_6H_4CH_3+CO+CH_4$	3.490E-08	6.21	1630
$C_{10}H_7CH_2+O_2 \rightleftharpoons C_{10}H_7HCO+OH$	3.760E+15	–1.55	11322
$C_{10}H_7CH_2+O_2 \rightleftharpoons A2\text{-}X+CH_2O+O$	6.320E+11	0.00	14500
$C_{10}H_7CH_2+HO_2 \rightleftharpoons C_{10}H_7CH_2O+OH$	2.000E+11	0.00	00
$C_{10}H_7CH_2O \rightleftharpoons A2\text{-}X+CH_2O$	1.300E+14	0.00	1100
$indenoxy+H \rightleftharpoons indenyl+OH$	1.500e+13	0.00	00
$phCH_2O+OH \rightarrow phHCO+H_2O$	1.716E+09	1.18	-447
$acrol \rightleftharpoons C_2H_4+CO$	2.450E+12	0.00	67128
$A2OH+O \rightleftharpoons indenoxy+HCO$	4.210E+13	0.00	2410
$HCCO+OH \rightleftharpoons C_2O+H_2O$	3.000E+13	0.00	00
$OC_6H_4CH_3 \rightleftharpoons C_6H_6+H+CO$	2.510E+11	0.00	43900
$C_{10}H_{20}qjBqA \rightarrow CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2$	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}qjCqA \rightarrow CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2$	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}qjDqA \rightarrow CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2$	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}qjEqA \rightarrow CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2$	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}qjAqB \rightarrow CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2$	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}qjCqB \rightarrow CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2$	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}qjDqB \rightarrow CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2$	7.000E+15	0.00	42065

$C_{10}H_{20}$qjEqB→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjFqB→CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjAqC→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjBqC→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjDqC→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjEqC→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjFqC→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjGqC→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjAqD→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjBqD→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjCqD→CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjEqD→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjFqD→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjGqD→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjHqD→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjAqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjBqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjCqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjDqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjFqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjGqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjHqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065
$C_{10}H_{20}$qjIqE→ CH_3O+3C_2H_4+C_2H_5+OH+CO_2	7.000E+15	0.00	42065

Note: 'ph' : C_6H_5. La nomenclature utilisée est disponible en l'Annexe 1.

Davantage de réactions de croisement décrivant les interactions entre les espèces intermédiaires et les composants du carburant ont aussi été ajoutées (Tableau 31). Nos résultats d'expériences en tube à choc ont montré une influence significative des réactions de croisement à basse température (T<900K). Comme déjà mentionné, ces réactions de croisements accélèrent les processus d'oxydation à basse température où les radicaux hydrocarbonés ont une concentration élevée. Cependant, l'influence de ces réactions sur les modélisations en JSR était moins importante.

Tableau 31. Nouvelles réactions ajoutées pour des changements à basse température. [k = A T^n exp(–E/RT) en cal, mol, cm^3, s]

Reactions	*A*	*n*	*E*
C_6H_5OH+C_2H_2→A-styryl+OH	3.210E+13	0.00	8910
C_6H_6+mo8j→mo+C_6H_5	3.000E+12	0.00	14000
C_6H_6+mo7j→mo+C_6H_5	3.000E+12	0.00	14000
C_6H_6+mo6j→mo+C_6H_5	3.000E+12	0.00	14000
C_6H_6+mo5j→mo+C_6H_5	3.000E+12	0.00	14000
C_6H_6+mo4j→mo+C_6H_5	3.000E+12	0.00	14000
A2oh+C_2H_6→naphthalene+OH+C_2H_5	18.210E+14	0.00	16410
AC_7H_{15}+toluene⇌phCH_2+nC_7H_{16}	1.000E+11	0.00	12000
BC_7H_{15}+toluene⇌phCH_2+nC_7H_{16}	1.000E+11	0.00	12000

CC_7H_{15}+toluene⇌ $phCH_2$+nC_7H_{16}	1.000E+11	0.00	12000
DC_7H_{15}+toluene⇌ $phCH_2$+nC_7H_{16}	1.000E+11	0.00	12000
C_7H_{15}qjA+toluene⇌ C_7H_{15}qA+$phCH_2$	4.000E+11	0.00	14000
C_7H_{15}qjB+toluene⇌ C_7H_{15}qC+$phCH_2$	4.000E+11	0.00	14000
C_7H_{15}qjD+toluene⇌ C_7H_{15}qD+$phCH_2$	4.000E+11	0.00	14000
C_6H_5+ nC_7H_{16}⇌AC_7H_{15}+ C_6H_6	9.000E+11	0.00	15000
C_6H_5+ nC_7H_{16}⇌BC_7H_{15}+ C_6H_6	9.000E+11	0.00	15000
C_6H_5+ nC_7H_{16}⇌CC_7H_{15}+ C_6H_6	9.000E+11	0.00	15000
C_6H_5+ nC_7H_{16}⇌DC_7H_{15}+ C_6H_6	9.000E+11	0.00	15000
C_7H_{14}-1+$phCH_2$⇌CC_7H_{13}-1+toluene	1.000E+11	0.00	17000
C_7H_{14}-2+ $phCH_2$⇌DC_7H_{13}-1+toluene	1.000E+11	0.00	17000
C_7H_{14}-3+ $phCH_2$⇌AC_7H_{13}-3+toluene	1.000E+11	0.00	17000
$C_{10}H_{20}$-1+$C_{10}H_7CH_2$⇌$CC_{10}H_{19}$-1+$C_{10}H_7CH_3$	1.000E+11	0.00	17000
$C_{10}H_{20}$-2+$C_{10}H_7CH_2$⇌$DC_{10}H_{19}$-2+$C_{10}H_7CH_3$	1.000E+11	0.00	17000
$C_{10}H_{20}$-3+$C_{10}H_7CH_2$⇌$EC_{10}H_{19}$-3+ $C_{10}H_7CH_3$	1.000E+11	0.00	17000
$C_{10}H_{20}$-4+ $C_{10}H_7CH_2$⇌$FC_{10}H_{19}$-4+ $C_{10}H_7CH_3$	1.000E+11	0.00	17000
C_7H_{15}qjA+phHCO⇌phCO+ C_7H_{15}qA	3.000E+12	0.00	9000
C_7H_{15}qjB+ phHCO⇌phCO+ C_7H_{15}qA	3.000E+12	0.00	9000
C_7H_{15}qjC+ phHCO⇌phCO+ C_7H_{15}qA	3.000E+12	0.00	9000
C_7H_{15}qjD+ phHCO⇌phCO+ C_7H_{15}qA	3.000E+12	0.00	9000
AC_8H_{17}+toluene⇌$phCH_2$+nC_8H_{18}	2.000E+11	0.00	14000
BC_8H_{17}+toluene⇌$phCH_2$+nC_8H_{18}	1.000E+11	0.00	12000
CC_8H_{17}+toluene⇌$phCH_2$+nC_8H_{18}	1.000E+11	0.00	12000
DC_8H_{17}+toluene⇌$phCH_2$+nC_8H_{18}	1.000E+11	0.00	12000
C_6H_5+nC_8H_{18}⇌AC_8H_{17}+C_6H_6	9.000E+11	0.00	15500
C_6H_5+nC_8H_{18}⇌BC_8H_{17}+C_6H_6	9.000E+11	0.00	15500
C_6H_5+nC_8H_{18}⇌CC_8H_{17}+C_6H_6	9.000E+11	0.00	15500
C_6H_5+nC_8H_{18}⇌DC_8H_{17}+C_6H_6	9.000E+11	0.00	15500
$C_{10}H_{21}$ojA+A2OH→naphthalene+$C_{10}H_{20}$rDqA	3.000E+12	0.00	00
$C_{10}H_{21}$ojB+A2OH→naphthalene+$C_{10}H_{20}$rAqB	3.000E+12	0.00	00
$C_{10}H_{21}$ojC+A2OH→naphthalene+$C_{10}H_{20}$rAqC	3.000E+12	0.00	00
$C_{10}H_{21}$ojD+A2OH→naphthalene+$C_{10}H_{20}$rAqD	3.000E+12	0.00	00
$C_{10}H_{21}$ojE+A2OH→naphthalene+$C_{10}H_{20}$rAqE	3.000E+12	0.00	00
A2oh+ $AC_{10}H_{21}$→naphthalene+OH+$C_{10}H_{20}$-1	1.000E+11	0.00	9500

A2oh+ $BC_{10}H_{21}$→naphthalene+OH+$C_{10}H_{20}$-2	1.000E+11	0.00	9500
A2oh+ $CC_{10}H_{21}$→naphthalene+OH+$C_{10}H_{20}$-3	1.000E+11	0.00	9500
A2oh+ $DC_{10}H_{21}$→naphthalene+OH+$C_{10}H_{20}$-4	1.000E+11	0.00	9500
A2oh+ $DC_{10}H_{21}$→naphthalene+OH+$C_{10}H_{20}$-5	1.000E+11	0.00	9500
$C_{10}H_{21}$qjA+phHCO→phCO+ $C_{10}H_{21}$qA	3.000E+12	0.00	9000
$C_{10}H_{21}$qjB+phHCO→phCO+ $C_{10}H_{21}$qB	3.000E+12	0.00	9000
$C_{10}H_{21}$qjC+phHCO→phCO+ $C_{10}H_{21}$qC	3.000E+12	0.00	9000
$C_{10}H_{21}$qjD+phHCO→phCO+ $C_{10}H_{21}$qD	3.000E+12	0.00	9000
$C_{10}H_{21}$qjE+phHCO→phCO+ $C_{10}H_{21}$qE	3.000E+12	0.00	9000
A2R5+O_2→A2-X+2CO+H	9.570e+20	–2.27	7189
napht+O_2→indenoxy+CO+H	3.000e+13	0.00	8982
memj+O_2⇌memOO	4.520e+12	0.00	00
C_9H_{19}CO+O_2⇌C_9H_{19}COOO	4.520e+12	0.00	00

Dans cette nouvelle version du modèle cinétique, nous proposons un mécanisme composé de 7866 réactions réversibles impliquant 1975 espèces qui prédit raisonnablement la cinétique de l'allumage et l'oxydation des mélanges de carburants de type gazole et bio-Diesel. Il est disponible dans l'Annexe 2.

b) Effet des changements apportés sur les prédictions en JSR

Après les modifications apportées au mécanisme, une comparaison a été effectuée sur une série d'expériences menées en JSR (Figure 87).

La Figure 87 présente les profils de concentration, simulés avec le nouveau modèle et avec le modèle précédent. On peut observer que les profils calculés avec le nouveau mécanisme sont en meilleur accord avec les profils expérimentaux que les simulations utilisant notre schéma cinétique précédent. Des accords similaires ont été observés pour les autres richesses. Il est à noter que ce modèle a aussi été testé avec succès pour l'oxydation du *n*-décane pur, de l'octanoate de méthyle pur, et du 1-méthylnaphtalène pur sous des conditions similaires en JSR.

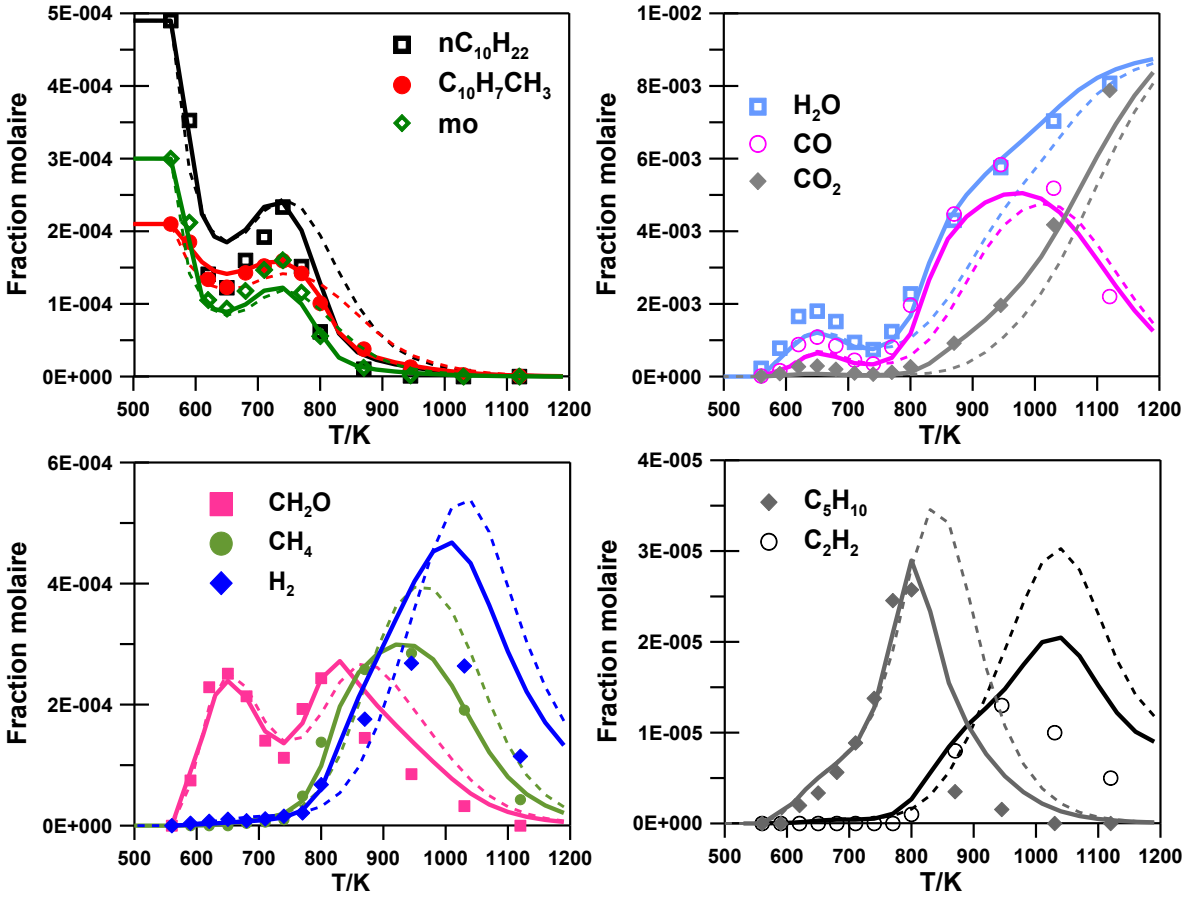


Figure 87. Oxydation du carburant modèle B30 en JSR : P= 10 bar, τ = 1s et φ = 1. Symboles: résultats expérimentaux. Lignes continues: mécanisme modifié, Lignes en pointillées: mécanisme précédent.

4.4.2 Confrontation modèle-expérience en tube à choc

Le modèle cinétique initial surestimait les mesures avec un facteur maximal de 1.6. Cependant, dans les mêmes conditions, le nouveau modèle cinétique améliore les prévisions avec une erreur maximale de 30% (Figure 88).

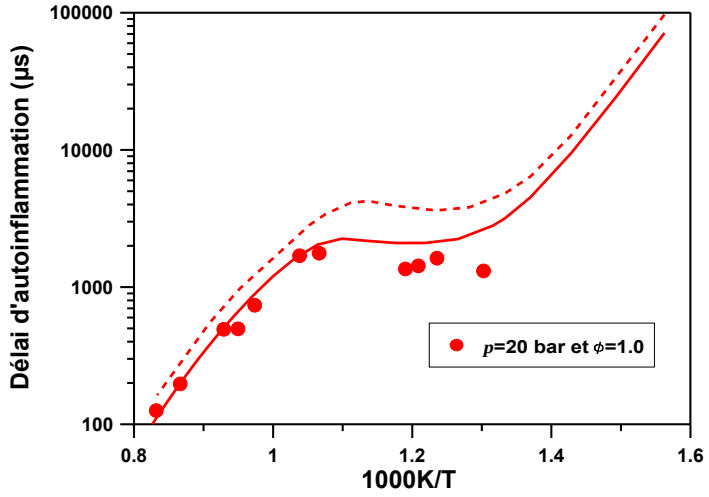


Figure 88. Délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle type B30 dans l'air: φ = 1.0 et 20 bar. Ligne continue : nouveau mécanisme : Ligne en pointillé ancien modèle cinétique.

Les Figure 89 et la Figure 90 illustrent la confrontation entre les modélisations cinétiques et les résultats expérimentaux obtenus en tube à choc pour différentes richesses étudiées et à deux pressions (20 et 40 bar). Comme on peut le voir sur ces figures, le modèle prédit l'évolution des délais dans le zone NTC, à basse température, mais aussi l'effet de la pression.

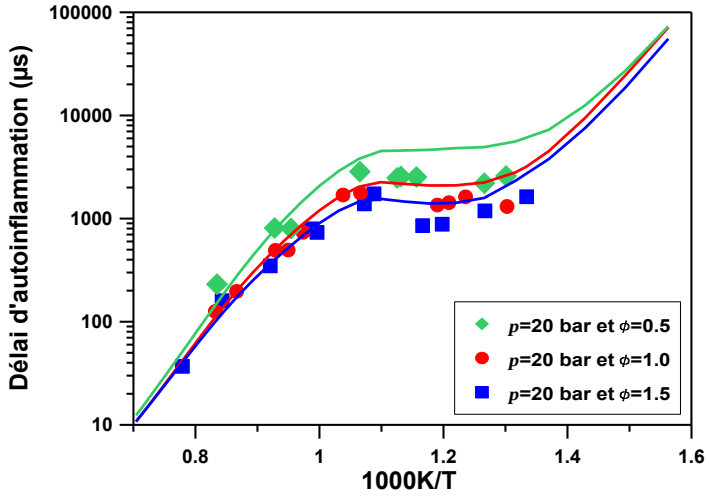


Figure 89. Confrontation entre les délais d'auto-inflammation simulés et mesurés pour l'oxydation de carburant modèle B30 dans l'air à 20 bar. Losange : données expérimentales pour *φ* = 0.5 ; Cercles: données expérimentales pour φ = 1.0 ; Carrés: données expérimentales à φ = 1.5. Les lignes correspondent aux simulations.

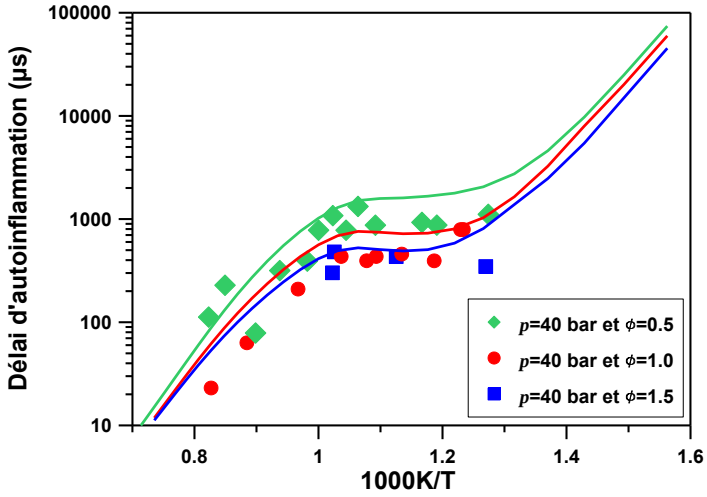


Figure 90. Confrontation entre les délais d'auto-inflammation simulés et mesurés pour l'oxydation de carburant modèle B30 dans l'air à 40 bar. Losange: données expérimentales pour φ = 0.5 ; Cercles: données expérimentales pour φ = 1.0 ; Carrés: données expérimentales à φ = 1.5. Les lignes correspondent aux simulations.

La Figure 91 montre aussi l'excellent accord entre les simulations et les expériences à T>970K. Cependant, à haute pression, le modèle surestime les délais d'auto-inflammation aux mêmes températures (T>970K) et l'effet des liaisons alkyle-oxygène, présentes dans l'octanoate de méthyle, sur les délais d'auto-inflammation ne peut pas être simulé. Ainsi, même si les prédictions sont en accord avec les expériences (Figure 89 et Figure 90), des améliorations sont nécessaires à T<900K et P>40bar. On notera que ce modèle cinétique a aussi été testé avec succès pour simuler: (1) les délais l'auto-inflammation du n-décane pur et du 1-méthylnaphtalène dans l'air à 13 bar et φ =1 (Pfahl et al. 1996), et ceux du 1-méthylnaphtalène pur (Wang et al. 2010) à 10 bar et φ =1.

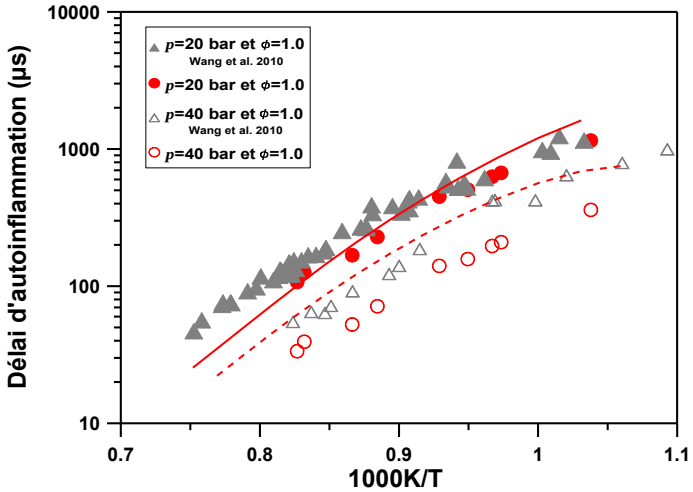


Figure 91. Confrontation entre délais d'auto-inflammation simulés et mesurés en tube à choc pour le carburant modèle de type B30-cercles (cette étude) et le carburant modèle de type gazole-triangles (Wang *et al.* 2010) à 20 bar (symboles pleins), à 40 bar (symboles vides). Lignes continues: prédictions à 20 bar et lignes en pointillés : prédictions à 40 bar.

4.4.2.1 Analyse de voies réactionnelles et de sensibilité

La Figure 92 présente les principales voies d'oxydation des constituants d'un B30 modèle. Alors que toutes les données expérimentales ont été obtenues à des températures supérieures à 750K, c'est à plus basse température (lorsque le processus d'auto-allumage commence) que les interactions entre les différents composants primaires du carburant et leurs premiers radicaux se déroulent. Pour cette raison, l'analyse de flux réactionnel à 640K est intéressante à réaliser. La Figure 92 représente les espèces majeures et les voies de réactions impliquées lors de l'oxydation du 1-méthylnaphtalène, du n-décane, et de l'octanoate de méthyle. Cela montre la complexité des processus chimiques qui interviennent lors de l'oxydation des composés hydrocarbonés.

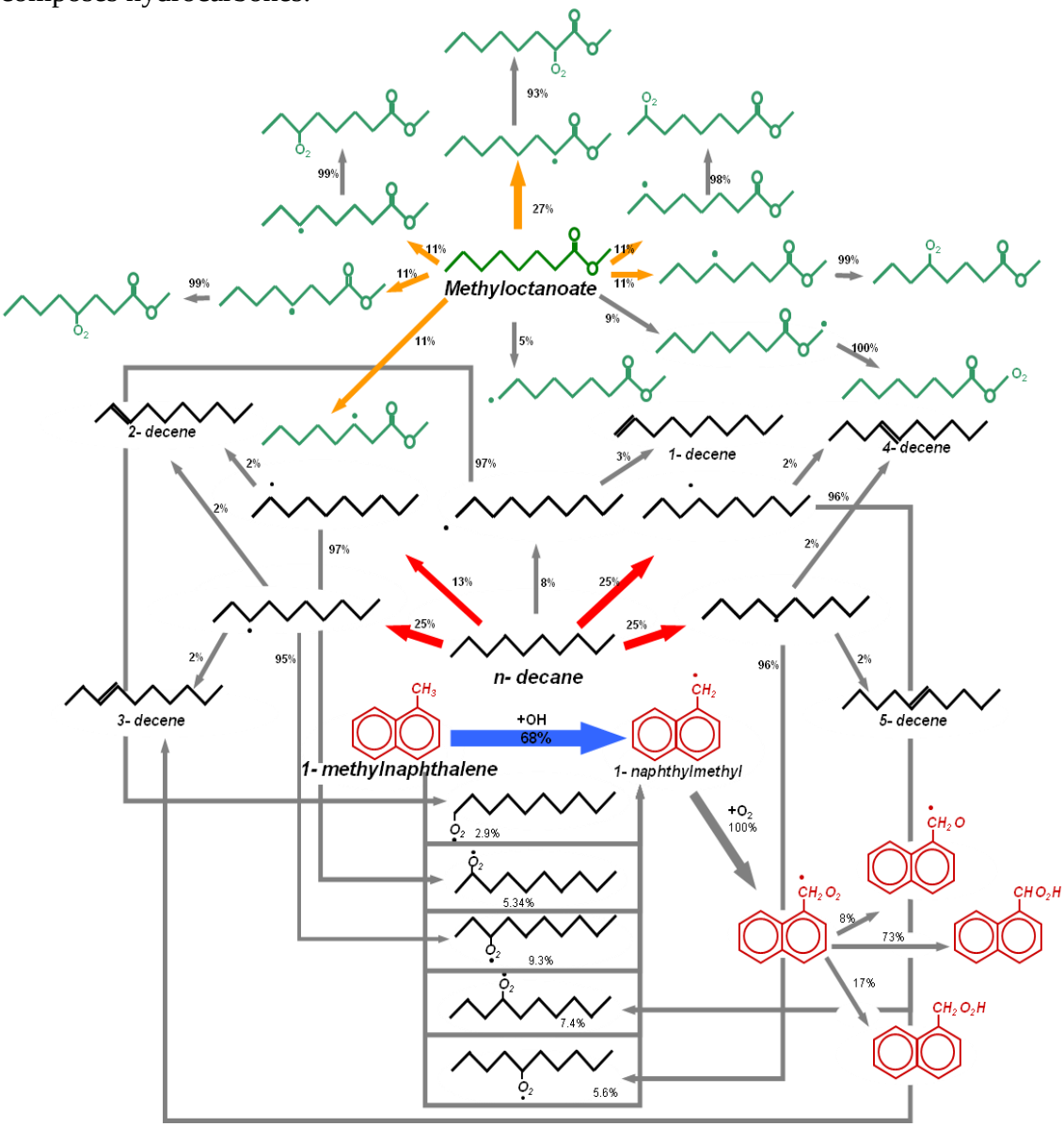


Figure 92. Analyse des principales voies réactionnelles lors de l'oxydation du B30 modèle à 640 K, 20 bar, φ=1 ; consommation du carburant : 1-méthylnaphtalène, 0,15% ; *n*-décane, 0,011% et octanoate de méthyle, 0,01%.

Le principal résultat de l'analyse de flux réactionnel est la mise en évidence des interactions des radicaux primaires avec les composants du carburant modèle ou des espèces stables (Tableau 31). Le schéma réactionnel montre que les radicaux issus des premiers arrachements d'atomes d'hydrogène sont obtenus par métathèse avec $OH^{\bullet}$. En même temps et avec un moindre effet, les radicaux primaires sont impliqués dans les réactions d'arrachement de H. Ainsi, comme le montre la Figure 92, ces réactions impliquent des arrachements d'atomes d'hydrogène par le radical 1-naphthylméthyle ($C_{10}H_{22}+C_{10}H_7CH_2^{\bullet} \rightleftarrows C_{10}H_{21}^{\bullet}+C_{10}H_7CH_3$) et les radicaux alkylpéroxy ($C_{10}H_7CH_3+ C_{10}H_{21}O_2^{\bullet} \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2^{\bullet}+ C_{10}H_{21}O_2H$). De même on peut voir sur la Figure 92 qu'approximativement 31% du 1-methylnaphthalene est consommé par des réactions d'arrachement d'atomes d'hydrogène initiés par les différents radicaux décylpéroxy pour former du 1-naphthylméthyle. Environ 98% de ces radicaux alkylpéroxy proviennent du *n*-décane. On peut aussi observer que la plupart des réactions d'arrachement d'atomes d'hydrogène impliquent des radicaux OH. Par conséquent, 68% du 1-méthylnaphtalène est consommé pour former le radical 1-naphthylméthyle stabilisée par résonance, 96% de *n*-décane forme des *n*-décyles et 90% de l'octanoate de méthyle forme les radicaux moXj ($C_7H_{14}^{\bullet}C(=O)OCH_3$). Tous ces radicaux primaires forment principalement des radicaux péroxy par fixation de O_2: environ 98% de moXOO•, 100% de $C_{10}H_7CH_2OO$• et environ 95% of $C_{10}H_{21}OO$• sont formés de cette manière. Dans le cas particulier du *n*-décane, 5% de radicaux décyles produisent des oléfines via l'oxydation par O_2. Tous ces radicaux péroxy s'isomérisent en radicaux alkylhydropéroxy correspondants qui à leur tour fixent à nouveau une molécule d'O_2, comme on pourrait s'attendre dans cet intervalle de température.

Les analyses de voies réactionnelles dans ces conditions n'ont pas montré de grand changement dans ce mécanisme modifié par rapport à notre mécanisme initial. Cependant, à cette température, il a été observé que les voies chimiques ont légèrement été changées pour le *n*-décane : $C_{10}H_{22}+C_{10}H_7CH_2^{\bullet} \rightleftarrows C_{10}H_{21}^{\bullet}+C_{10}H_7CH_3$ (9.8% comparé à 5.7% avec le mécanisme précédent), pour le 1-méthylnaphtalène via $C_{10}H_7CH_3$ +OH• $\rightleftarrows$ $C_{10}H_7CH_2^{\bullet}$ + H_2O (68.0% comparé à 60.5%) et pour $C_{10}H_7CH_3$ + $C_{10}H_{21}O_2$• $\rightleftarrows$ $C_{10}H_7CH_2^{\bullet}$ + $C_{10}H_{21}O_2H$. (30.5% comparé à 27.2%). Cependant, l'importance des réactions des radicaux OH ne présente pas de changement majeur par rapport au modèle initial.

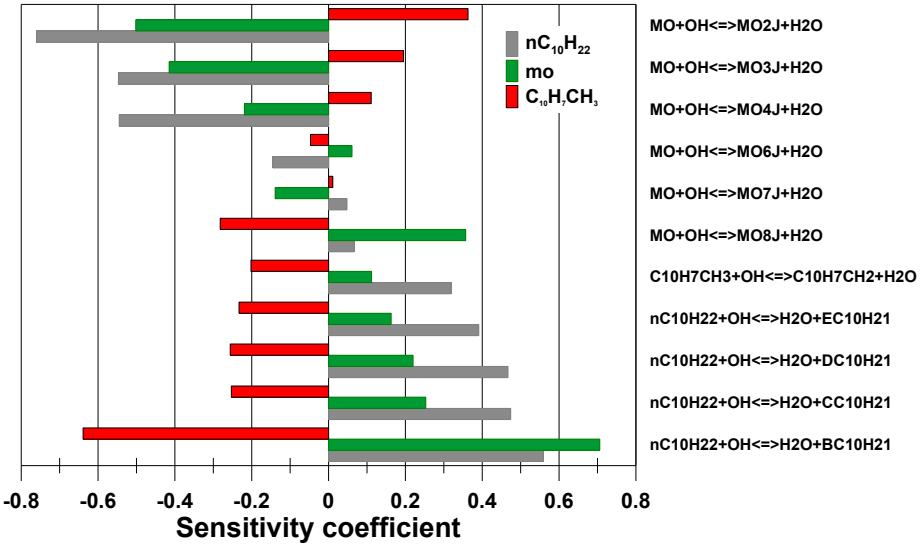


Figure 93.Analyse de sensibilité pour le carburant modèle B30 à 640 K, φ = 1, 20 bar et une consommation de 0,15% du 1-méthylnaphtalène, de 0,011% du *n*-décane et de 0,01% de l'octanoate de méthyle.

La Figure 93 présente les coefficients de sensibilité pour les constituants du B30 modèle dans des conditions identiques. D'après les simulations, les fractions de *n*-décane et d'octanoate de méthyle sont plus sensibles aux réactions de $nC_{10}H_{22}$ avec $OH^{\bullet}$

$nC_{10}H_{22}+OH^{\bullet} \rightleftarrows BC_{10}H_{21}^{\bullet}+H_2O$ ($S_{nc10h22}$=0.559, S_{mo}=0.706 et $S_{c10h7ch3}$=-0.339),
$nC_{10}H_{22}+OH^{\bullet} \rightleftarrows CC_{10}H_{21}^{\bullet}+H_2O$ ($S_{nc10h22}$=0.474, S_{mo}=0.253 et $S_{c10h7ch3}$=-0.253),
$nC_{10}H_{22}+OH^{\bullet} \rightleftarrows DC_{10}H_{21}^{\bullet}+H_2O$ ($S_{nc10h22}$=0.467, S_{mo}=0.220 et $S_{c10h7ch3}$=-0.256),
$nC_{10}H_{22}+OH^{\bullet} \rightleftarrows EC_{10}H_{21}^{\bullet}+H_2O$ ($S_{nc10h22}$=0.391, S_{mo}=0.163 et $S_{c10h7ch3}$=-0.233),

$C_{10}H_7CH_3$ et MO sont aussi consommés par réaction avec $OH^{\bullet}$ via $C_{10}H_7CH_3+ OH^{\bullet} \rightleftarrows C_{10}H_7CH_2+H_2O$ ($S_{nc10h22}$=0.319, S_{mo}=0.112 ; $S_{c10h7ch3}$=-0.202) et MO+ $OH^{\bullet} \rightleftarrows MO8J+H_2O$ ($S_{nc10h22}$=0.067, S_{mo}=0.357 ; $S_{c10h7ch3}$=-0.282).

Il est à noter qu'à 640K seuls deux composants primaires du carburant modèle B30 (*n*-décane et octanoate de méthyle) montrent des sensibilités similaires, contrairement au 1-méthylnaphtalène qui est oxydé grâce à ce « pool de radicaux » primaires produit par l'oxydation du *n*-décane et de l'octanoate de méthyle à basse température.

Lors de la présente étude, nous avons pu montrer que ces réactions de croisement deviennent moins importantes lorsque la température augmente. Ceci est dû à la baisse de la concentration des radicaux lourds avec l'augmentation de la température. Par conséquent, les réactions entre de plus petits radicaux deviennent plus importantes comme on peut le voir dans nos analyses à 760K, 910K et 1210K à 20 bar et en mélange stœchiométrique (Figure 94, Figure 96 et Figure 98).

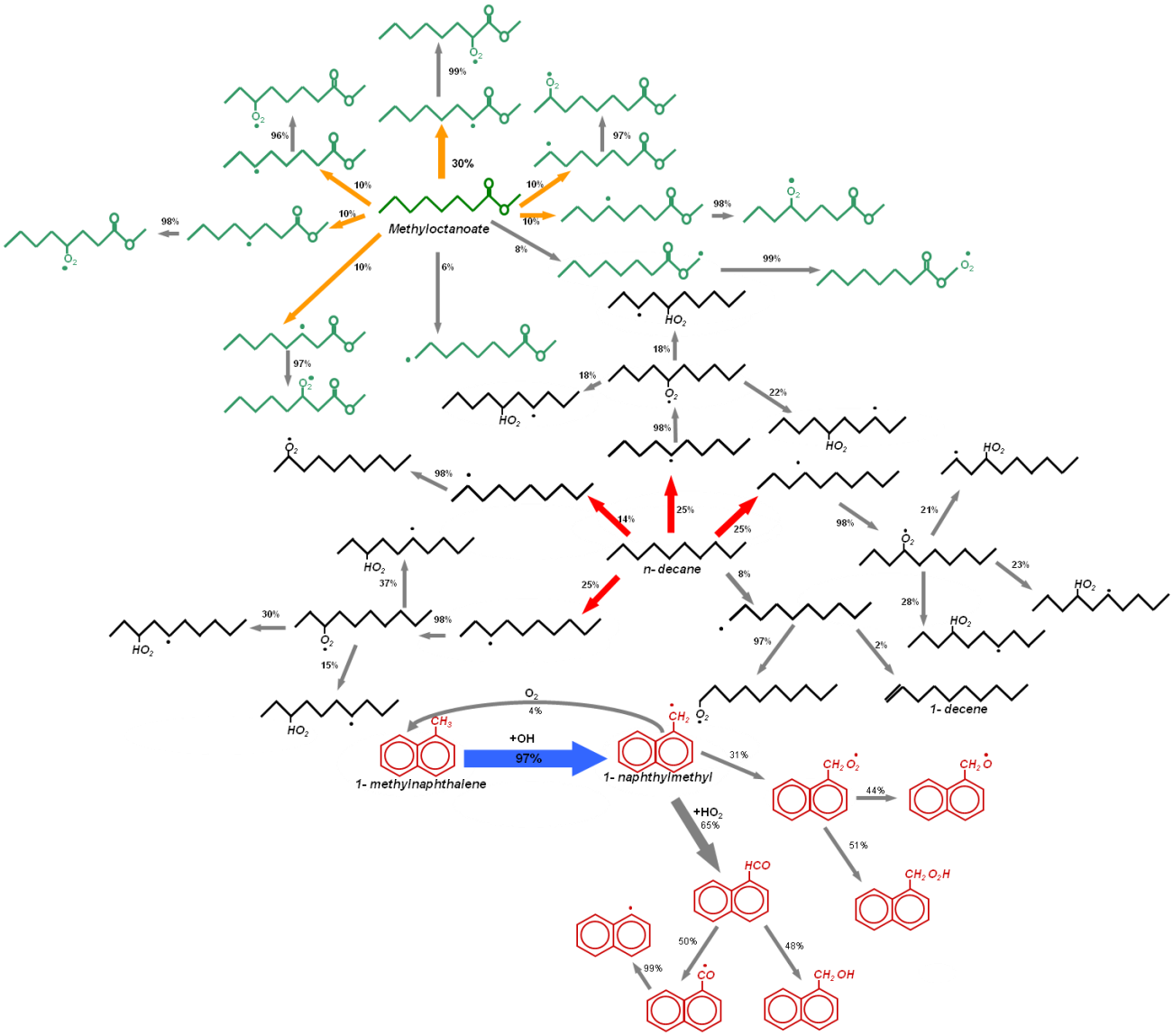


Figure 94. Analyse des principales voies réactionnelles lors de l'oxydation du carburant modèle type B30 à 760 K, 20 bar, φ=1 et pour une consommation de 38,98% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 13,2% de l'octanoate de méthyle.

Au début du régime de coefficient négatif de température (conditions montrées dans la Figure 94), le carburant subit un arrachement d'atomes d'hydrogène par $OH^{\bullet}$ et $O^{\bullet}$ principalement, pour produire des radicaux primaires. Par exemple, la consommation du *n*-décane se fait via l'arrachement d'atomes d'hydrogène à 4,4% par $O^{\bullet}$, à 91,4% par $OH^{\bullet}$ et à 1,2% par d'autres radicaux pour produire des radicaux décyles. En parallèle, le 1-méthylnaphtalène produit principalement du 1-naphthylméthyle (97% via des réactions avec $OH^{\bullet}$), suivi d'une formation d'alkylpéroxy et enfin par une isomérisation des radicaux alkylhydropéroxy. Les voies de consommations principales de l'octanoate de méthyle sont l'arrachement d'atomes d'hydrogène par $H^{\bullet}$ (2%), $CH_3O^{\bullet}$ (5%), et $OH^{\bullet}$ (87.7%) pour donner des radicaux moXj. A cette température, la plupart des radicaux primaires réagissent également en fixant O_2. Ainsi, environ 97% des radicaux décyles et moXj forment un alkylpéroxy par fixation de O_2. Par contre, 31% du 1-naphthylméthyle réagit avec O_2 pour produire $C_{10}H_7CH_2OO^{\bullet}$et 65% réagi avec HO_2 pour produire le 1-naphthylaldéhyde. Finalement, les radicaux alkylpéroxy s'isomérisent en radicaux alkylhydropéroxy

avant de commencer le processus de ramification (RO_2• ⇄ QOOH et $OOQO_2H^{\bullet}$ → HOOQ'O_2H →2OH).

En ce qui concerne la consommation du carburant, seules les voies d'oxydation du du 1-méthylnaphtalène sont modifiées par les cinétiques mises à jour. La consommation du 1-methylnaphtalene via $C_{10}H_7CH_3$+$OH^{\bullet}$⇄$C_{10}H_7CH_2^{\bullet}$+H_2O représente 94% au lieu de 75% dans le mécanisme initial.

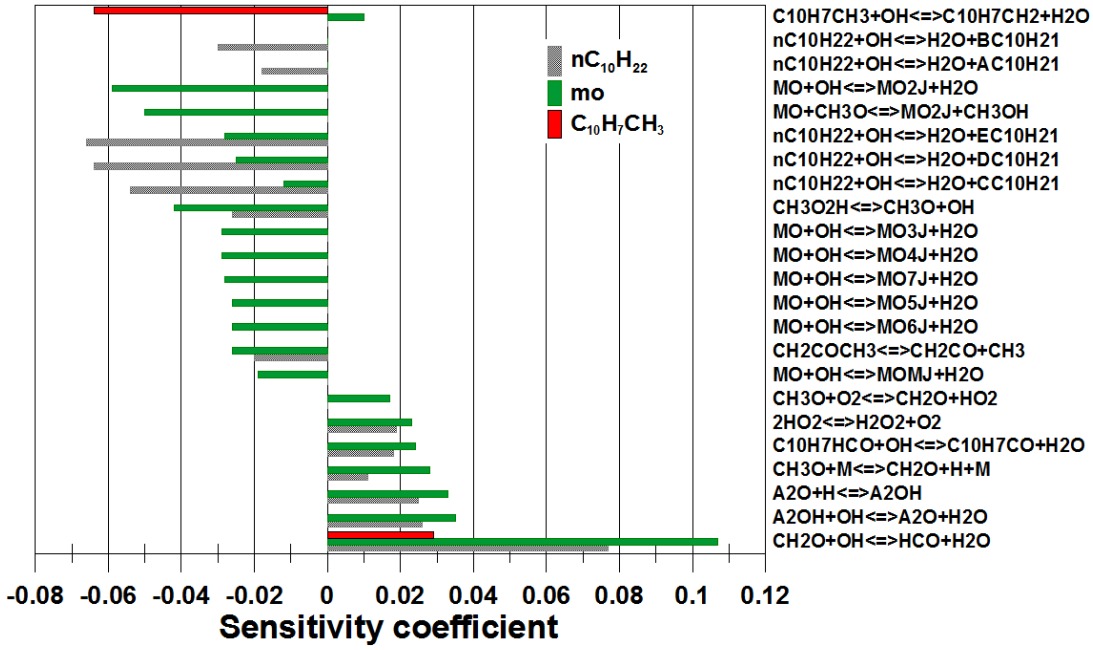


Figure 95. Analyse de sensibilité pour le carburant modèle B30 à 760 K, φ = 1, 20 bar et pour une consommation du 38,98% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 13,2% de l'octanoate de méthyle.

Les résultats des analyses de sensibilité de l'oxydation du carburant modèle B30 dans ces conditions sont présentées sur la Figure 95. Dans ce cas, la concentration du 1-méthylnaphtalène devient sensible à la réaction d'arrachement d'atomes d'hydrogène par $OH^{\bullet}$ ($CH_2O^{\bullet}$+$OH^{\bullet}$⇄ $HCO^{\bullet}$+H_2O; $S_{c10h7ch3}$= 0.029). Cette réaction réduit également la réactivité du *n*-décane et de l'octanoate de méthyle au début du NTC ($S_{nc10h22}$= 0.077 and S_{mo}=0.107) car elle consomme les radicaux OH• au dépent des constituants du carburant. D'après ces résultats, le 1-méthylnaphtalène, le *n*-décane, et l'octanoate de méthyle sont principalement consommés via des arrachements d'atomes d'hydrogène par OH• ($S_{c10h7ch3}$= -0.064 $S_{nc10h22}$= -0.066 et S_{mo}= -0.059) donnant les premiers radicaux primaires.

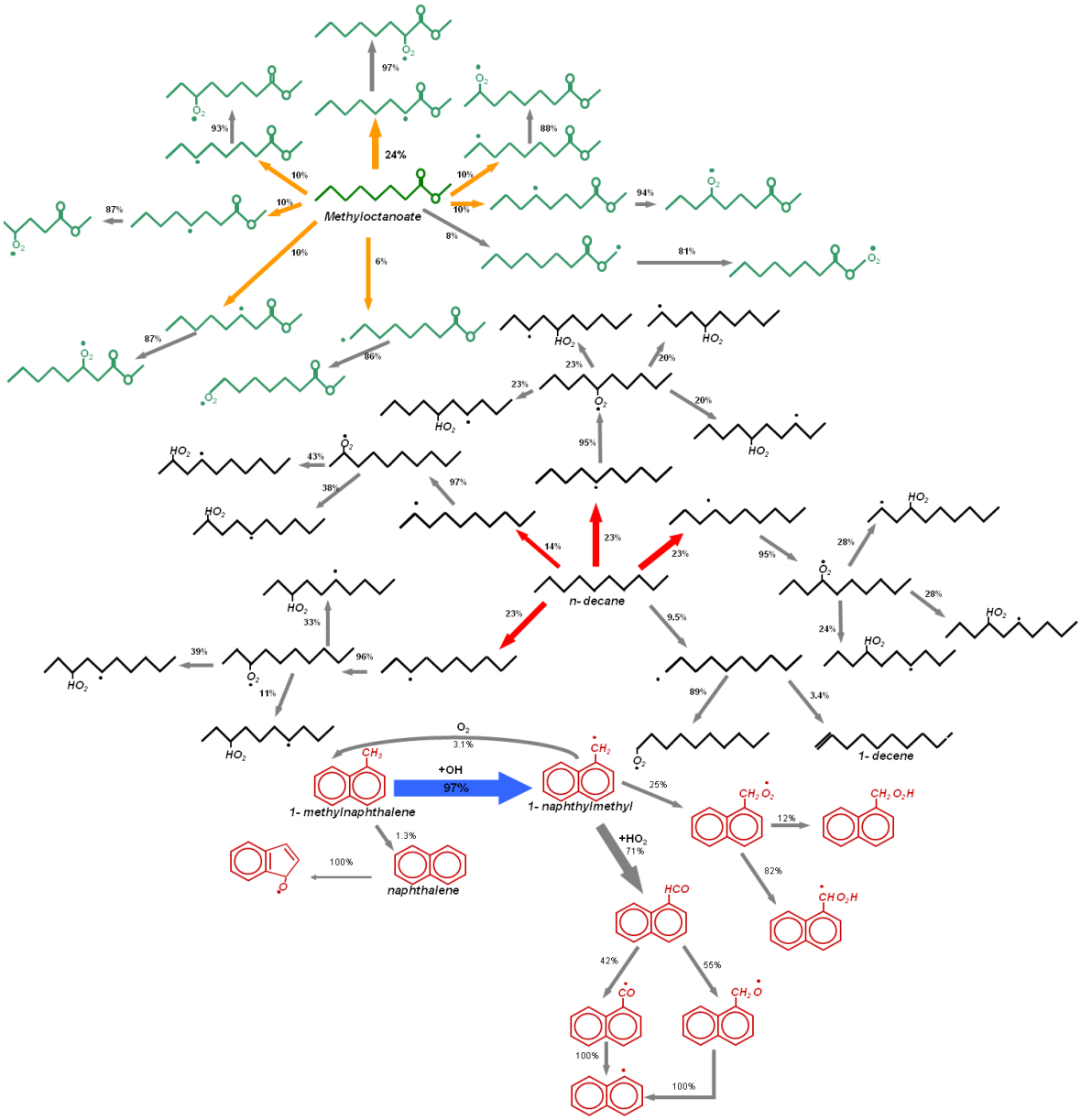


Figure 96. Analyse des principales voies réactionnelles pour l'oxydation du B30 modèle à 910 K, 20 bar, φ=1 et pour une consommation de 21,69% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et 64,14% de l'octanoate de méthyle.

Un comportement similaire, avec des flux différents, a été observé à la fin du NTC (Figure 96). Comme prévu, les principales voies de consommation sont des arrachements d'atomes d'hydrogène par les petits radicaux. A 910K et dans les mêmes conditions (20 bar et φ = 1), les principales voies de consommation du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène sont des métathèses avec les radicaux $OH^{\bullet}$ et $O^{\bullet}$ pour produire les radicaux décyles et 1-naphthylméthyle. Le 1-méthylnaphtalène produit également le naphtalène (1.3% via réaction avec $H^{\bullet}$). Puis, le napthylméthyle produit le 1-naphtaldéhyde (71% via réaction avec $HO_2^{\bullet}$). Ces réactions sont suivies d'une formation d'alkylperoxy et ensuite d'une isomérisation en alkylhydropéroxy. Parallèlement, les voies de consommation de l'octanoate de méthyle sont encore une fois des métathèses avec $H^{\bullet}$ (1.2%), $CH_3O^{\bullet}$ (1.3%), et $OH^{\bullet}$ (81.3%) pour donner des

radicaux moXj. Par la suite, la plupart des radicaux primaires réagissent en fixant O_2: entre 81 et 97% de radicaux moXj produisent moXoo et près de 96% des décyles produisent des décylpéroxy. Le 1-naphthylméthyle a le même comportement qu'avant et seulement 25% réagit avec O_2 pour produire $C_{10}H_7CH_2OO^{\bullet}$ et 71% réagit avec $HO_2^{\bullet}$ pour produire le 1-naphtaldéhyde.

En ce qui concerne la production de $OH^{\bullet}$ à 910K, comme avant, une augmentation de seulement 1% a été observée avec le mécanisme modifié par rapport au mécanisme initial. Les principales réactions responsables de la production de $OH^{\bullet}$ dans le régime NTC sont : $2OH^{\bullet}$ (+M) ⇄ H_2O_2 (+M), $CH_3^{\bullet}+HO_2^{\bullet}$ ⇄ $CH_3O^{\bullet}+OH^{\bullet}$, et QOOH ⇄ $QO^{\bullet}+OH^{\bullet}$.

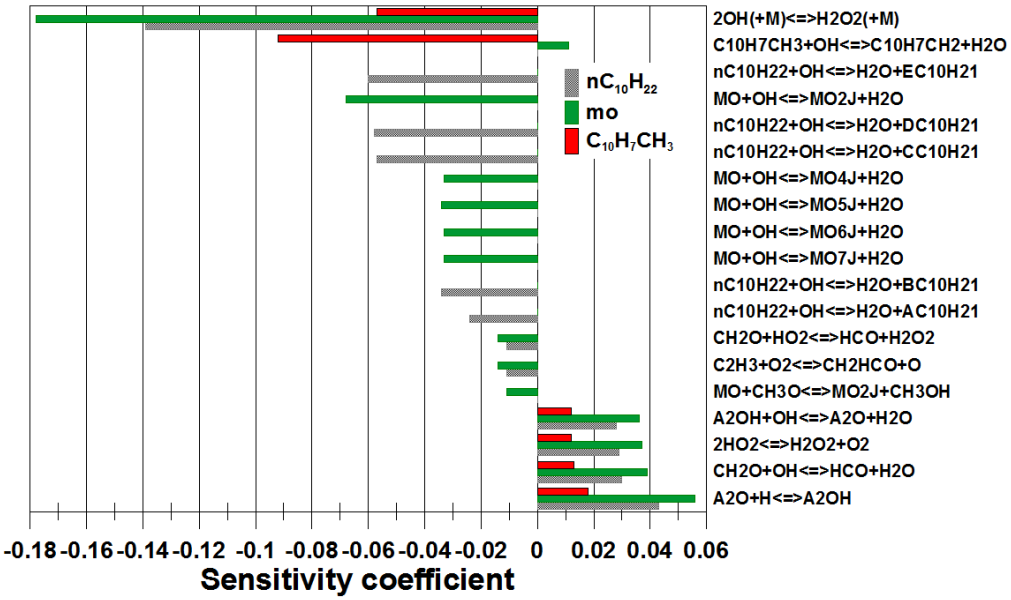


Figure 97. Analyse de sensibilité pour le B30 modèle à 910 K, φ = 1, 20 bar et une consommation de 21,69% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 64,14% de l'octanoate de méthyle.

La Figure 97 montre les coefficients de sensibilité des constituants du carburant dans les mêmes conditions à la fin du régime NTC. Ici, on peut également observer que les métathèses par OH produisent des radicaux primaires. Cependant, la consommation du carburant est plus sensible à la réaction impliquant la décomposition de H_2O_2 pour générer deux radicaux OH ($S_{C10H7CH3}$=-0.139, $S_{nC10H22}$=-0.057 et S_{mo}=-0.178). Inversement, la réaction de formation de A_2OH via $A_2O^{\bullet}+H^{\bullet}$ ⇄ A_2OH est la réaction la plus inhibitrice ($S_{C10H7CH3}$= 0.043, $S_{nC10H22}$= 0.018, and S_{mo}= 0.056).

Il est aussi intéressant d'observer le comportement cinétique à haute température. Pour cela, une analyse des voies réactionnelles a été effectuée à 1210K, 20 bar et dans des conditions stœchiométriques (Figure 98).

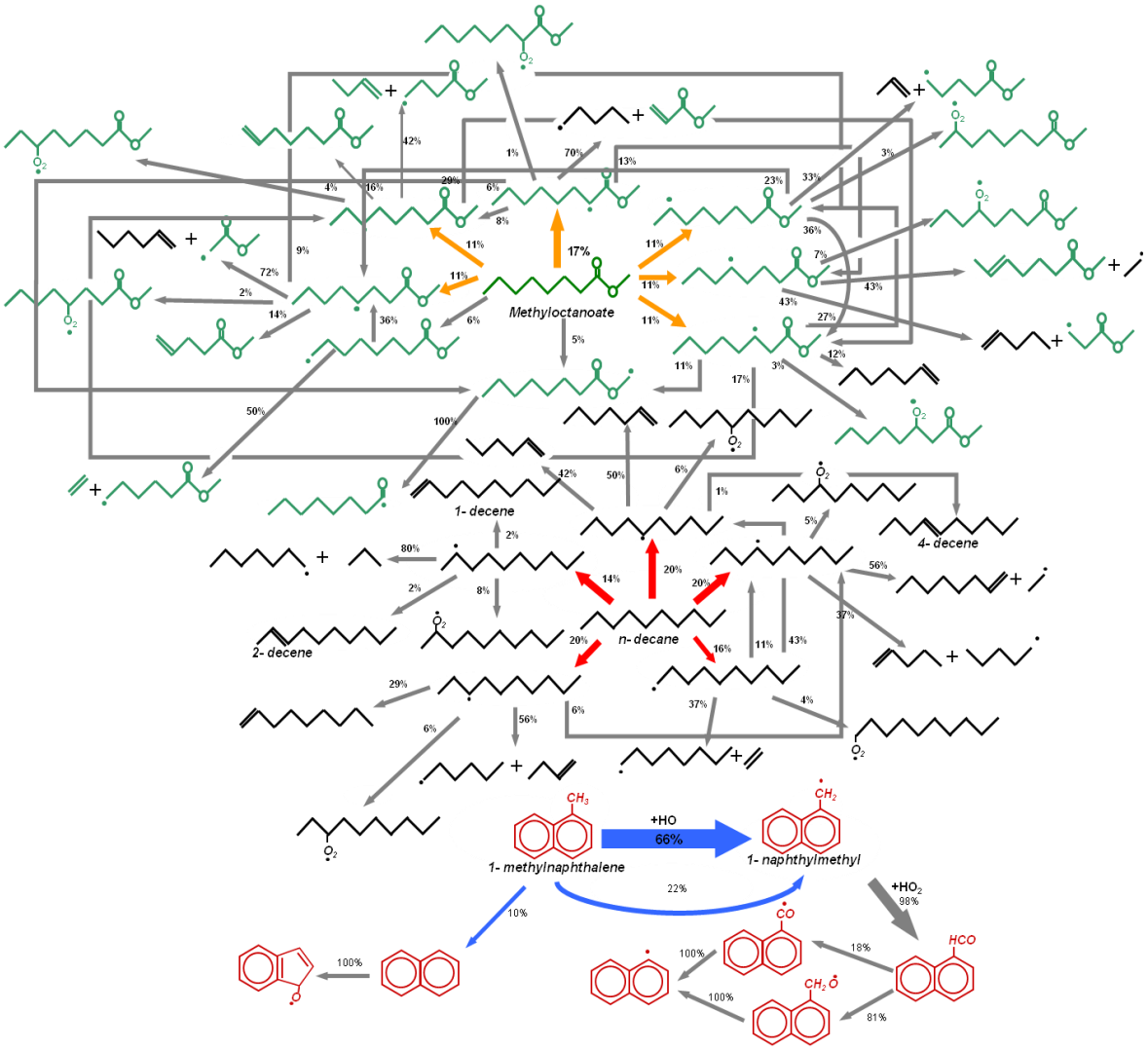


Figure 98. Analyse des principales voies réactionnelles lors de l'oxydation du B30 modèle à 1210 K, 20 bar, φ=1 et pour une consommation de 19,08% du 1-méthylnaphtalène, de 45,74% du *n*-décane et de 60,71% de l'octanoate de méthyle.

Dans ces conditions, l'arrachement d'atomes d'hydrogène a lieu principalement avec $H^{\bullet}$, $CH_3^{\bullet}$, O_2, et $O^{\bullet}$. Ces réactions deviennent plus importantes qu'en NTC (760 et 910K). On peut aussi observer une augmentation de l'importance des isomérisations de radicaux, ce qui entraîne une diminution de formation des alkylpéroxy. Les réactions dominantes sont les réactions de craquage produisant des composés hydrocarbonés légers. Des arrachements d'atomes d'hydrogène du *n*-décane ont lieu par réaction avec $OH^{\bullet}$ (59.3%), $H^{\bullet}$ (17.6%), $O^{\bullet}$ (8.8%), et $CH_3^{\bullet}$ (3.1%) produisant des radicaux décyles. Les arrachements d'atomes d'hydrogène à partir de l'octanoate de méthyle ont lieu principalement par réaction avec $H^{\bullet}$ (23.8%) et $OH^{\bullet}$ (43.8%), donnant les radicaux moXj. Le 1-napthylméthyle est formé par l'arrachement d'atomes d'hydrogène du 1-méthylnaphtalène avec $OH^{\bullet}$ (66%), $H^{\bullet}$ (14%), O_2 (5%), et $CH_3^{\bullet}$ (3%). Le naphtalène est formé par les réactions de $H^{\bullet}$ (10%) avec le 1-méthylnaphtalène. Les radicaux primaires du *n*-décane subissent une cassure de liaison C−C (β-scission) produisant des oléfines lourdes (≈ 30%), de petites oléfines et des petits radicaux (≈ 50%). L'isomérisation des radicaux (décyle et moXj) par transfert d'atomes d'hydrogène est également observée. Avec les ruptures de liaisons C−C de l'octanoate de méthyle par

β-scissions, les petites oléfines, les petits radicaux carbonylés (ca. de 30 à 50%) et les moXoo (≈ 5%) sont produits. Un comportement différent a été observé pour les radicaux 1-naphthylméthyle pour lesquels la réaction de fixation d'O_2 devient moins importante tandis que la réaction principale implique $HO_2^{\bullet}$(98%) pour produire du 1-naphtaldéhyde.

$$R_a^{\bullet} \rightleftarrows R_b^{\bullet}$$

$$R^{\bullet} \rightleftarrows R_{\text{Small radical}}^{\bullet} + R_{\text{olefin}}$$

La consommation de l'octanoate de méthyle via mo+OH$^{\bullet}$⇄ moXj+H_2O a été affectée par l'augmentation de production de OH (par ≈ 1%, comparé au mécanisme initial). Le même comportement a été observé pour le 1-méthylnaphtalène, dont la consommation a augmenté de ≈1% via $C_{10}H_7CH_3$+OH$^{\bullet}$⇄$C_{10}H_7CH_2^{\bullet}$+H_2O, tandis que celle du *n*-décane via $nC_{10}H_{22}$⇄OH$^{\bullet}$+$BC_{10}H_{21}^{\bullet}$ a augmenté d'environ 3%. Cependant, la production d'OH apparaît via les mêmes voies que pour le cas précédent. Les réactions principales produisant OH$^{\bullet}$ à 1210K sont 2OH$^{\bullet}$ (+M) ⇄ H_2O_2 (+M), H$^{\bullet}$+$HO_2^{\bullet}$ ⇄ 2OH$^{\bullet}$, et $CH_3^{\bullet}$+$HO_2^{\bullet}$ ⇄ $CH_3O^{\bullet}$+OH$^{\bullet}$

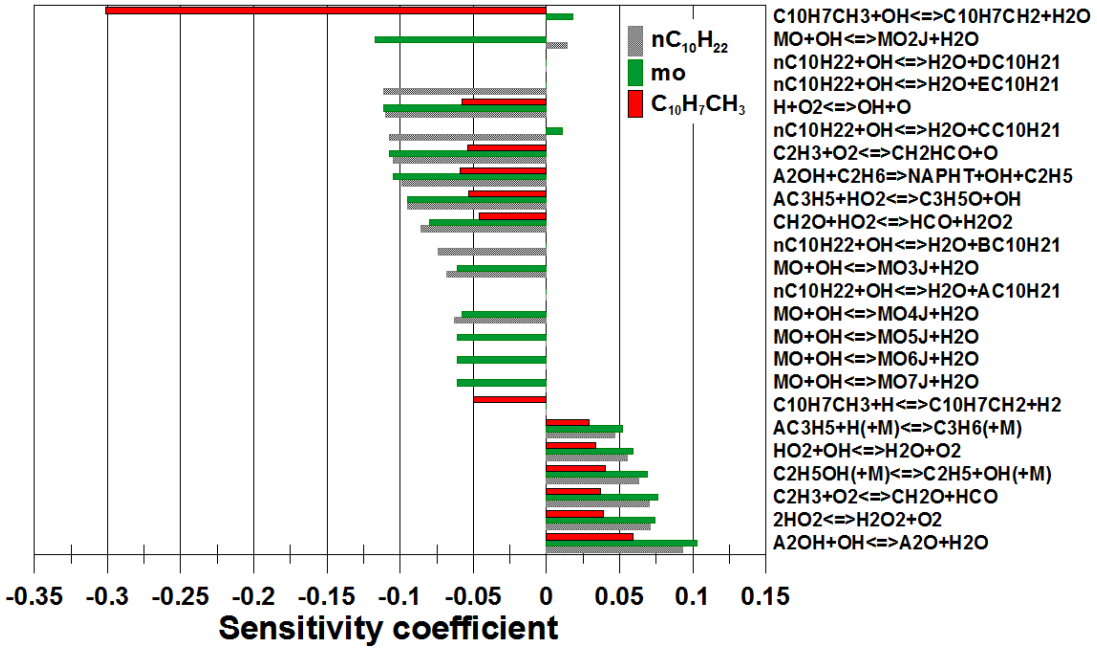


Figure 99. Analyse de sensibilité pour le B30 modèle à 1210 K, φ = 1, 20 bar et pour une consommation de 19,08% du 1-méthylnaphtalène, de 45,74% du *n*-décane et de 60,71% de l'octanoate de méthyle.

La Figure 99 présente les résultats des analyses de sensibilité de l'oxydation du carburant modèle B30. Comme on pouvait s'y attendre, les analyses de sensibilité à 1210K n'ont pas révélé un comportement inhabituel de la chimie à haute température. Le système est principalement sensible aux cinétiques du sous-mécanisme C_0-C_1, c'est-à-dire aux réactions : H$^{\bullet}$+O_2 ⇄ OH$^{\bullet}$+O, $HO_2^{\bullet}$+OH$^{\bullet}$ ⇄ H_2O+O_2, et $CH_2O^{\bullet}$+$HO_2^{\bullet}$ ⇄ HCO$^{\bullet}$+H_2O_2.

Conclusion

Dans cette partie de l'étude, on a mesuré les délais d'auto inflammation du carburant modèle type B30 composé de 49% mol de *n*-décane/ 21% mol d'1-méthylnaphthalène/ 30% mol d'octanoate de méthyle. Ces expériences ont été réalisées dans un tube à choc du Laboratoire IVG de l'Université de Duisburg en Allemagne, à 20 et 40 bar, pour des richesses comprises entre 0,5 et 1,5 et dans l'intervalle de températures 700 $<T_5<$1200 K. Le schéma d'oxydation développé dans le chapitre précédent a été amélioré grâce à ces données expérimentales obtenues en tube à choc où les données à basse température sont utiles pour apporter des améliorations au modèle. Ainsi, le nouveau modèle d'oxydation est capable de décrire raisonnablement les délais d'auto-inflammation d'un carburant modèle de type B30 dans une large gamme de conditions (700 à 1200 K, 20 et 40 bar, φ= 0,5-1,5) ainsi que des données expérimentales de la littérature pour l'auto-inflammation du n-décane, du 1-méthylnaphtalène et d'un carburant modèle de type gazole.

Des données expérimentales complémentaires portant sur les vitesses de flamme des carburants modèles déjà considérés dans ce travail, ainsi que les modélisations cinétiques associées, seront présentées dans le chapitre suivant.

Chapitre 5

Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de carburants modèles en flammes laminaires pré-mélangées

Lorsque l'on fournit une énergie, idéalement ponctuelle, à un mélange combustible, pris dans des conditions de température et de pression données, on initie des réactions chimiques qui vont se propager à l'ensemble du mélange sous la forme d'un front que l'on pourra détecter et suivre. La vitesse à laquelle se propage cette zone réactionnelle est fonction du mélange combustible (nature du carburant, la teneur en oxygène, …) des conditions initiales de température et de pression et de la géométrie.

5.1 Régimes de propagation de flamme.

Il existe deux types de propagation de flamme en fonction de sa vitesse de déplacement : la déflagration et la détonation. Lorsque la vitesse est subsonique par rapport aux gaz frais, on parle d'une déflagration. Par contre, si la vitesse de propagation du front de flamme est supersonique, on parle d'une détonation. La déflagration se déplace dans le pré-mélange et sa vitesse peut, dans certains cas, évoluer au cours du temps pour former une détonation, on parle alors de transition entre déflagration et détonation.

Lors de la déflagration, l'écoulement de gaz à travers le front de flamme peut être laminaire ou turbulent. Ainsi, si l'écoulement est laminaire, la vitesse de gaz frais par rapport au front de flamme dans une direction normale à celui-ci aura une grandeur caractéristique au type de mélange carburant/oxydant, cela signifie que la vitesse laminaire de flamme est une propriété intrinsèque du mélange combustible. Cette vitesse prend également les appellations « vitesse de flamme laminaire », « vitesse fondamentale de combustion » ou encore « vitesse normale de combustion ».

Les flammes laminaires sont provoquées par un allumage ponctuel de source faible dans un milieu libre d'obstacles. Cette flamme adopte une forme sphérique dans sa phase initiale et en l'absence de parois, limitée par les gaz frais, lors de sa propagation.

5.2 Structure d'une flamme de pré-mélange

On distingue plusieurs zones dans un front de flamme qui, selon les différentes théories, peuvent inclure les principaux phénomènes fondamentaux. Ainsi, entre les

théories les plus répandues se trouvent : la théorie thermique de Mallard et Le Châtelier, la théorie de Zeldovich, Frank-Kamenetskii et Semenov et enfin, les théories radicalaires complètes.

5.2.1 Théorie thermique : Loi de Mallard et Le Châtelier

Dans cette théorie, la propagation de la flamme est contrôlée par des phénomènes de diffusion thermique. Ainsi, ils découpent le front de flamme en deux zones : Une zone de préchauffage d'épaisseur δp, où les gaz combustibles sont portés à une température suffisante pour que l'inflammation ait lieu, et une zone réactionnelle d'épaisseur δr (δr≈0,1.(δp+ δr)) où le dégagement de chaleur se produit. Cette zone est donc délimitée par la température d'inflammation du coté des gaz frais, et par la température d'équilibre après combustion du côté des gaz brûlés.

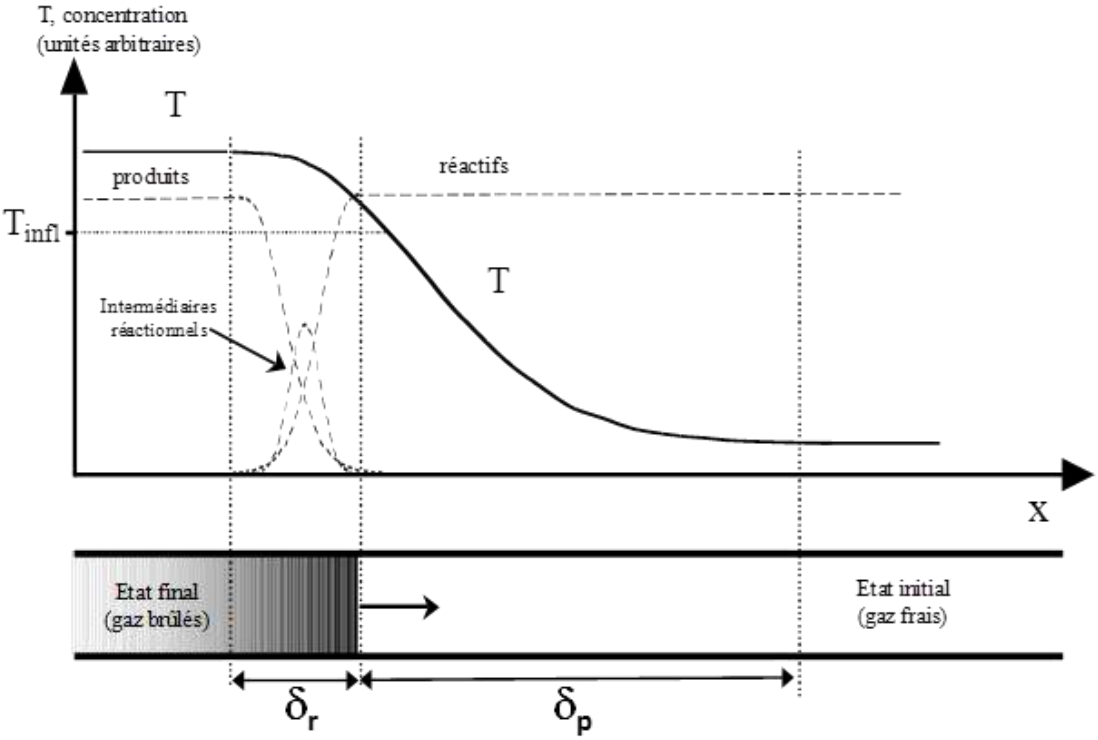


Figure 100. Structure de la flamme laminaire pré-mélangée.

Cette théorie permet de relier la vitesse fondamentale de flamme avec la vitesse de réaction globale :

$$S_\ell° \approx \sqrt{\alpha.\omega^\bullet} \qquad (1)$$

Où $\omega^\bullet$ est la vitesse de réaction chimique,

$\alpha = \dfrac{\lambda}{\rho.C_p}$ est la diffusivité thermique,

λ est la conductibilité thermique,

ρ est la densité

Cp est la capacité calorifique.

Ainsi, bien que l'on ne puisse pas évaluer la valeur de la vitesse fondamentale de flamme, elle permet néanmoins de déduire facilement son évolution en fonction d'une part de paramètres thermo-physiques et, d'autre par de la variation du taux de réaction en fonction de réactions en fonctions des conditions initiales.

5.2.2 Modèle de diffusion Thermique et massique : Zeldovich, Frank-Kamenetskii et Semenov.

Cette théorie se base sur celle de Mallard et Le Châtelier en incluant à la fois la diffusion des espèces et la diffusion de chaleur. Selon cette théorie, la température d'inflammation est très proche de la température adiabatique de flamme, car la vitesse de réaction suit une loi exponentielle. Dans le cas où les nombres adimensionnels de Schmidt et de Prandlt sont égaux à un, la résolution des équations de conservation mène à l'égalité suivante :

$$S_\ell^\circ = \sqrt{\frac{2.\lambda.C_{p,f}^{n}.Z'.n_{r,0}^{n-1}}{\rho_0.\overline{C}_p^{n+1}}\left(\frac{n_r}{n_p}\right)^n.\left(\frac{A}{B}\right)^n.\left(\frac{RT^2}{Ea}\right)^{n+1}.\left(\frac{e^{-\frac{Ea}{RT_f}}}{(T_f-T_0)^{n+1}}\right)} \qquad (2)$$

$$\Pr = \frac{\mu.Cp}{\lambda} = 1 \quad Sc = \frac{\mu}{\rho D} = 1 \quad Le = \frac{\alpha}{D} = \frac{A}{B}$$

où μ est la viscosité dynamique

D le coefficient de diffusion massique

α la diffusivité thermique
n_r et n_p sont les quantités de réactifs et de produits

λ est la conductibilité thermique

T_f est la température de flamme, T_0 est la température initiale

$\overline{C_p}$ et $C_{p,f}^n$ sont respectivement la capacité calorifique moyenne entre T_0 et T_f et la capacité calorifique calculée à T_f

T et *ρ* la température et la masse volumique

n représente l'ordre de la réaction bilan

Z' est un facteur pré-exponentiel et Ea est l'énergie d'activation globale.

5.3 Vitesse fondamentale de flamme

L'étude des propriétés d'une flamme dans certaines conditions permet d'obtenir la vitesse de propagation en l'absence de toute perturbation. Dans le cas d'un pré-mélange, le front de flamme plat se déplace en écoulement laminaire des gaz brûlés vers les gaz frais, la vitesse de flamme laminaire est définie comme la vitesse de progression de la flamme vers les gaz frais dans une direction normale à celui-ci. Cette propriété intrinsèque du mélange combustible peut être mesurée expérimentalement.

Plusieurs dispositifs expérimentaux permettent l'étude de flammes laminaires :

- Les brûleurs classiques (flamme quasi-conique), à flamme plate ou à jets opposés pour les flammes stationnaires
- La méthode de la bombe sphérique ou de la bulle de savon dans le cas de flamme en déplacement

Dans cette étude, les mesures ont été effectuées en bombe sphérique. Pour ce cas la vitesse fondamentale diffère de la vitesse spatiale en raison du changement des conditions thermodynamiques dans le front de flamme. Dans ce cas, le dégagement de chaleur dû à la réaction produit une augmentation de la température et donc du volume molaire. La vitesse spatiale mesurée est égale à la somme de la vitesse fondamentale de flamme et de la vitesse d'entraînement générée par l'expansion thermique:

$$V_s = u_g + u_n \quad (3)$$

où u_g est la vitesse des gaz frais induite par l'expansion de la flamme et u_n, la vitesse de combustion laminaire.

Ceci est appelé l'effet piston et est caractérisé par le taux d'expansion qu'il est possible de déterminer thermodynamiquement pour un mélange donné dans des conditions données : $\sigma = \frac{\rho_b}{\rho_u}$ avec ρ_b la masse volumique des gaz brûlés et ρ_u la masse volumique des gaz frais. Dans le cas d'une flamme infiniment mince en propagation sphérique, la relation générale s'écrit :

$$S_\ell = \frac{1}{\sigma}\left(V_s + \frac{r_b}{3P_b}\frac{dP_b}{dt}\right) \quad (4)$$

Lors de l'étude de la propagation dans une enceinte fermée, telle une bombe sphérique, il est nécessaire de tenir compte de la variation de la pression due à l'expansion thermique des gaz lors de la mesure de la vitesse fondamentale de flamme. Cependant, si l'observation de la propagation de la flamme se limite à un faible volume devant le volume de l'enceinte, il est possible de négliger cette variation de pression dans l'enceinte si la vitesse de flamme n'est pas très élevée par rapport à la vitesse du son dans les gaz frais. Le calcul de la vitesse fondamentale de flamme est donc possible en se basant sur les premiers instants de sa propagation.

5.4 Vitesse fondamentale de flamme à étirement nul

Lors de la propagation d'une flamme laminaire, cette dernière peut être soumise à un étirement. Cet étirement provient d'une vitesse tangentielle non nulle générée par les échanges de masse et de chaleur qui vont modifier la propagation de la flamme et, selon la méthodologie utilisée, ils peuvent être expliqués par :

- Une déformation de la zone réactionnelle due à la géométrie de l'écoulement (propagation sphérique par exemple)
- Un écoulement non-uniforme en amont du front de flamme (cas du brûleur à flamme plate)

Markstein a décrit les effets liés au rayon de courbure de la flamme sur sa structure où la vitesse normale de combustion u_n varie linéairement avec l'inverse du rayon de courbure, selon la relation :

$$u_n - S_l^0 = S_l^0 \cdot \frac{L'}{R} \quad (5)$$

où L'est une grandeur caractéristique de l'ordre de l'épaisseur du front de flamme

S_l^0 est la vitesse fondamentale de flamme à étirement nul

R est le rayon de courbure

Ainsi, l'étirement K est défini par le taux d'accroissement de la surface de la flamme A pour un intervalle de temps dt.

$$K = \frac{1}{A}.\frac{dA}{dt} \quad (6)$$

Pour une propagation de la flamme sphérique :

$$K = \frac{2}{r_f}.\frac{dr_f}{dt} \quad (7).$$

Pour un étirement faible, la théorie asymptotique des flammes prévoit une évolution linéaire de la vitesse fondamentale de flamme S_ℓ avec l'étirement permettant ainsi de déduire la vitesse fondamentale de flamme à étirement nul S_ℓ° :

$$S_\ell^\circ - S_\ell = L'.K \quad (8)$$

Le calcul de la vitesse fondamentale de flamme à étirement nul est donc possible :

$$V_s^\circ - V_s = L.K \text{ avec } L = \sigma \times L'$$

pour une propagation sphérique :

$$V_s^{\circ} - V_s = 2 \times L \times \frac{V_s}{r_f} \qquad (9)$$

Deux méthodes sont possibles pour la dérivation de V_S^0 à partir de l'évolution du rayon de la flamme en fonction du temps :

1. En exprimant le rayon sous la forme d'un polynôme de 5ème degré

$$r = \sum_{i=0}^{5} a_i t^i \quad \text{ou} \quad V_S = \sum_{i=0}^{5} a_i t^{i-1}$$

   Ce qui permet d'estimer K puis de tracer l'évolution de $V_S = f(K)$

2. En intégrant directement l'équation :

$$V_s^{\circ} - \frac{dr_f}{dt} = \frac{2L}{r_f} \times \frac{dr_f}{dt} \quad (10)$$

   Ce qui donne par intégration :

$$\frac{r_f}{r_{final}} = V_s^{\circ}\left(t - t_f\right) - 2L \ln\left(\frac{r_f}{r_{final}}\right)$$

avec r_{final} le rayon final de la flamme. Par régression multiple il est ainsi possible de déterminer la vitesse de propagation spatiale à étirement nul de la flamme. Connaissant la valeur du coefficient d'expansion σ, il est alors possible d'obtenir la vitesse fondamentale de combustion à étirement nul :

$$S_\ell^{\circ} = \frac{V_s^{\circ}}{\sigma} \quad (12)$$

5.5 Influence des conditions initiales sur la propagation des flammes

La vitesse normale de combustion est influencée par la température, la pression des gaz frais, la nature du combustible ou la richesse (rapport d'équivalence) du mélange.

5.5.1 Pression initiale

L'influence de la pression sur S_L est plus complexe. Cette influence dépend de la température de flamme et de la richesse du mélange. Ainsi, la vitesse fondamentale de flamme décroît avec la pression pour des flammes relativement froides comme le montre la Figure 101. En revanche, pour des flammes très chaudes, l'influence de la pression est faible, voire positive. Cette influence est également positive pour de fortes dilutions.

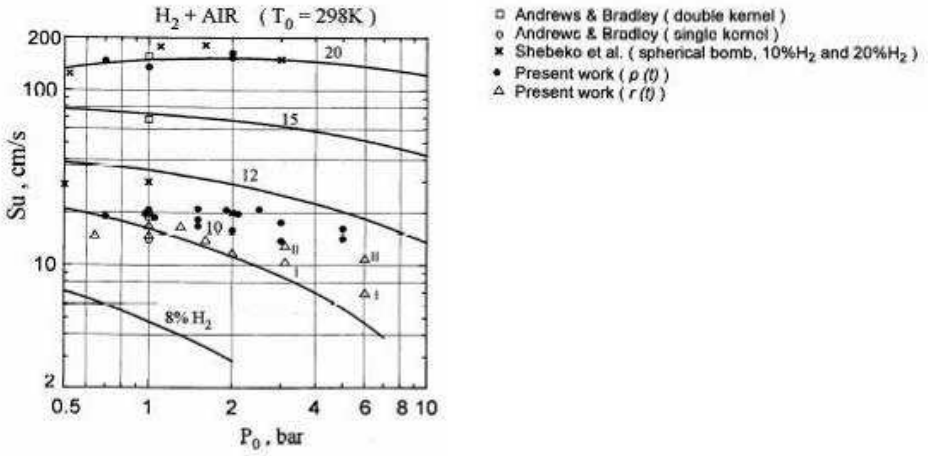


Figure 101. Influence de la pression initiale sur la vitesse fondamentale de flamme à 298 K. Gelfand 2000.

5.5.2 Température initiale

La vitesse fondamentale de flamme augmente avec la température ; en effet la cinétique est accélérée à haute température, comme le montre la relation d'Arrhenius (Figure 102) car la flamme cède moins de chaleur au mélange frais.

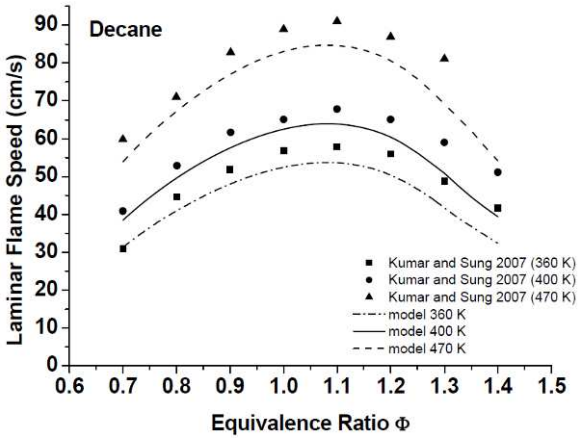


Figure 102. Influence de la température initiale sur la vitesse de flamme laminaire. Kumar *et al.* 2007; Kumar *et al.* 2007.

5.5.3 Influence du rapport d'équivalence

Le rapport d'équivalence (richesse) du mélange est défini par la relation:

$$\phi = \frac{\left(\frac{Fuel}{[oxygène]}\right)}{\left(\frac{[Fuel]}{[oxygène]}\right)_{stoe}} \qquad (13)$$

En général en augmentant la quantité de carburant dans le mélange combustible, la vitesse fondamentale de flamme augmente en passant par une valeur maximale aux environs de la valeur stœchiométrique, une richesse légèrement supérieure à 1, et au-delà, la vitesse décroit.

5.5.4 Influence de la dilution

La vitesse fondamentale de flamme diminue avec le taux de dilution du mélange. De plus, le diluant joue un rôle important sur S_L, soit au travers de la température de flamme, soit au travers de la diffusivité thermique. Ainsi, Ar et N_2 ont des diffusivités thermiques proches mais la capacité calorifique de N2 est légèrement plus grande que celle de Ar, alors $S_L(Ar) > S_L(N_2)$. Tandis que pour des capacités calorifiques identiques, comme c'est le cas pour les deux gaz nobles Ar et He, la différence en diffusivité thermique aura des effets sur la S_L : diffusivité thermique de He étant plus élevée que celle de Ar, S_L (He)> S_L (Ar), Figure 103.

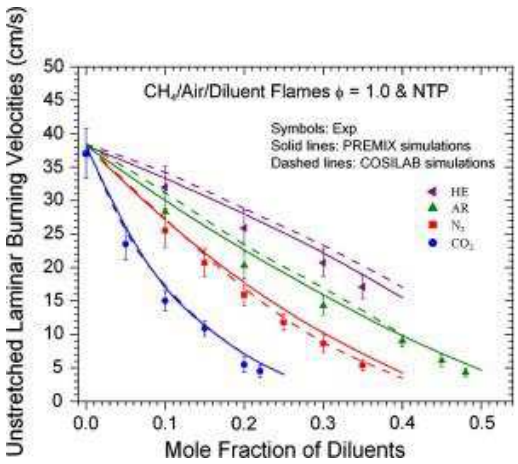


Figure 103. Influence du diluant initial sur la vitesse de flamme laminaire. Qiao *et al.* 2008.

5.5.5 Influence de la nature du combustible

La vitesse fondamentale de flamme dépend aussi de la structure chimique du carburant. Pour des hydrocarbures linéaires, la vitesse fondamentale de flamme augmente avec la longueur de chaîne ; tandis que pour les hydrocarbures ramifiés, la vitesse fondamentale de flamme diminue avec les ramifications. Egalement, la nature des liaisons joue un rôle important : les insaturations augmentent la vitesse laminaire de flamme.

Les péroxydes, aldéhydes et éthers possèdent des vitesses fondamentales de flamme élevées, spécialement lorsque les composés sont cycliques. Les corrélations sont plus complexes pour des mélanges de plusieurs hydrocarbures.

5.6 La Bombe Sphérique SF2

La bombe sphérique SF2 (Spherical Flame Facility) du laboratoire ICARE est le dispositif utilisé dans la troisième partie de cette étude pour les mesures de vitesse fondamentale de flamme. Ce dispositif permet de déterminer la vitesse normale de propagation ou de combustion de flamme de carburants en phase gazeuse, grâce à une source faible d'énergie qui démarre la combustion au centre de l'enceinte. Cette propagation aura lieu dans un milieu isolé, contrôlé et libre d'obstacles.

L'enceinte sphérique est constituée par deux sphères concentriques en acier inoxydable Z2CN18-10 de 476mm et 500mm chacune. Entre les deux sphères la circulation d'une huile chaude maintient la température du système. Les pressions des opérations, pour la sphère interne, peuvent varier entre 0 bar et 50bar et sa température d'opération peut varier jusqu'à 206°C. La Figure 104 montre en détail les éléments qui constituent la bombe sphérique de notre étude.

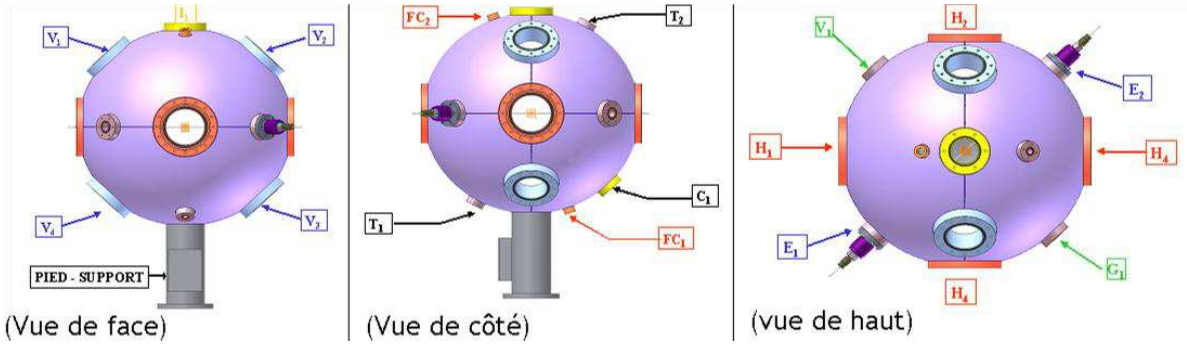


Figure 104. Différentes vues de la bombe sphérique utilisée durant cette étude : H_1 et H_4 hublots de visualisation de la flamme, E_1 et E_2 électrodes en tungstène, C_1 le capteur de pression, T_1 thermocouple, G_1 système d'introduction des gaz et FC_1 et FC_2 la circulation du fluide chauffant.

Figure 105. Vue de la seconde enveloppe de la bombe sphérique.

5.6.1 Principe de fonctionnement

La méthode de la bombe sphérique est associée à la technique de strioscopie laser (Figure 106) qui permet de visualiser la propagation de la flamme, à l'aide d'une caméra rapide (100 000 images/s). Ce dispositif permet également d'observer les instabilités du front de flamme et sa limite de propagation. La source lumineuse est focalisée grâce à une lentille bi-convergente de 200 mm. Le faisceau réfléchi sur le premier miroir traverse la bombe à travers les hublots de sections circulaires en quartz avant de trouver un second miroir hémisphérique de même focale que le premier. Les images sont projetées sur un écran placé entre la point focale image et la caméra.

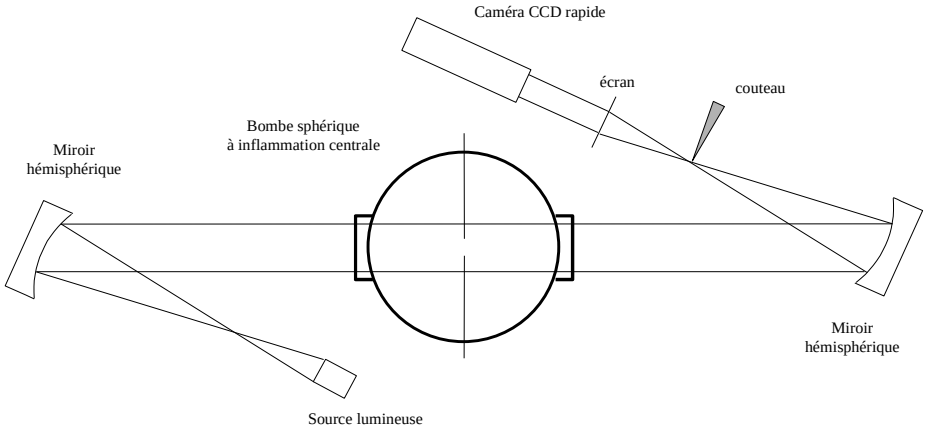


Figure 106. Dispositif de visualisation de la flamme par strioscopie laser.

La bombe sphérique est liée à 2 pompes à vide primaires de 20 m^3/h chacune. Pour son remplissage, lors de cette étude, les mélanges ont été préparés au sein du dispositif par la méthode des pressions partielles. L'hydrocarbure est vaporisé à travers un septum pendant que l'air sec est introduit par le système d'introduction des gaz. La pression est mesurée grâce aux manomètres capacitifs BARATRON -MKS (0-100 et 0 - 1 000 Torr), et par un capteur piézo-résistif 4075A10V64 - Kistler (0 - 10 bar).

Deux électrodes en tungstène reliées à un système de décharge de haute tension déclenchent l'inflammation au centre de la sphère, après introduction du mélange combustible (Figure 107). Les gaz brûlés de cette combustion adoptent une forme de propagation sphérique. La création de l'étincelle induit l'envoi d'un signal TTL permettant la synchronisation de l'acquisition vidéo et des enregistrements de capteur aux parois. A la fin de la combustion, le système est vidé grâce aux deux pompes de 20 m^3/h chacune.

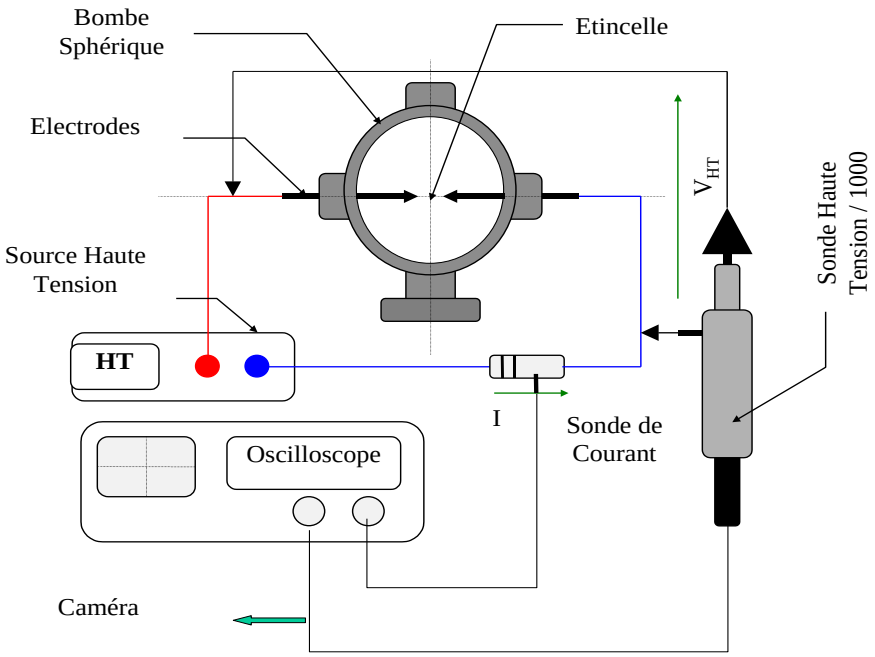


Figure 107. Schéma du dispositif d'inflammation des mélanges.

5.7 Méthodologie

Le déclenchement de l'étincelle au centre de la chambre active l'acquisition des images (512 x 512 pixels)à l'aide d'une caméra rapide à 6000 images/s via un signal TTL égal à zéro (Figure 108). La propagation sphérique se déroule à volume constant et le gaz dans lequel la flamme se déplace est lui à pression variable. Les images, tout au long de l'expérience, doivent être prises au début de la propagation de la flamme, quand la combustion est isobare et quasi isotherme.

L'évolution du rayon de la flamme en fonction du temps peut être extraite des images, et la vitesse de la flamme spatiale V_{SL} peut alors être déduite au travers de la pente de cette évolution, Figure 109.

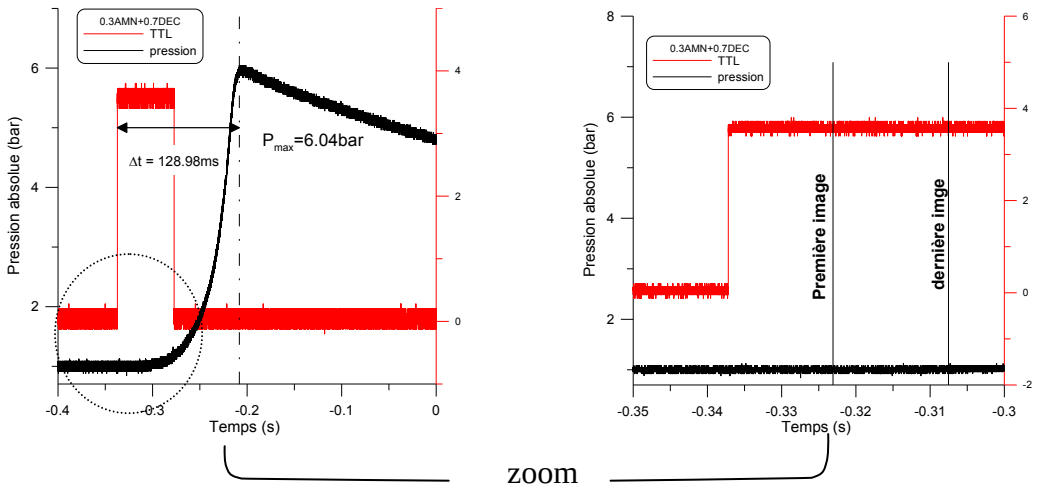
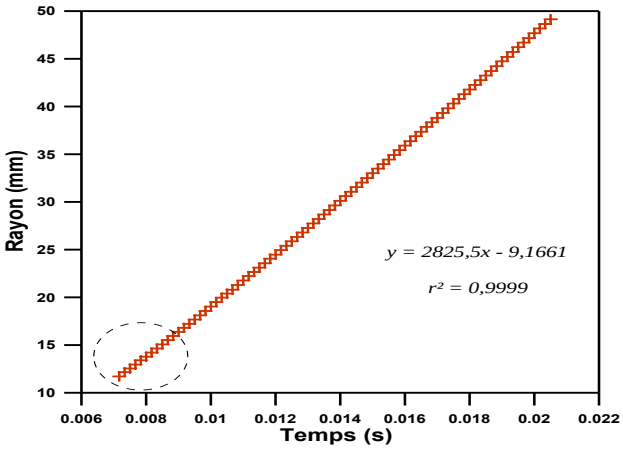
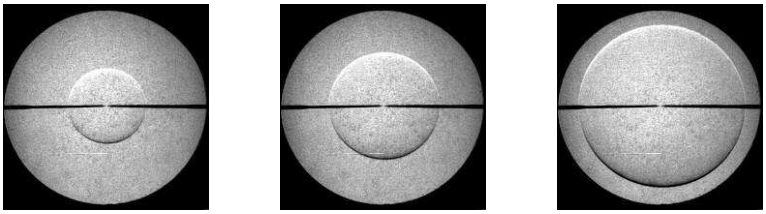


Figure 108. Exemple d'évolution de la pression durant l'acquisition d'une S_l. Le combustible est le gazole modèle.





10ms **13ms** **18ms**

Figure 109. Evolution du rayon de flamme en fonction du temps.

L'évolution de la pression est enregistrée pour chaque carburant à chaque richesse grâce à un oscilloscope. La Figure 110 montre des profils de pressions pour des expériences à différentes rapports d'équivalence de l'octanoate de méthyle à 423 K et 1 bar de pression initiale. Comme le montre la figure, les pics de pression sont plus instables (oscillation de la pression) pour des mélanges riches en reflétant la présence de cellules au sein de la flamme.

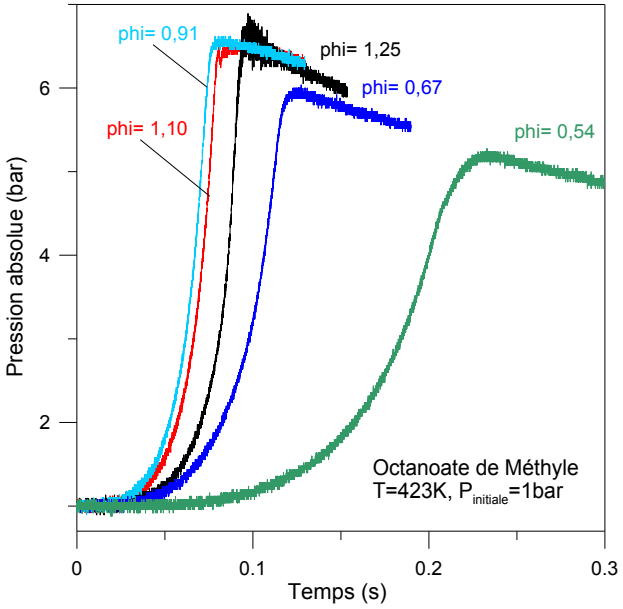


Figure 110. Evolution de la pression en fonction du temps de l'octanoate de méthyle pour un intervalle de rapports d'équivalence de 0,54 à 1,25.

Les expériences réalisées avec ce dispositif ont permis de suivre l'évolution de la vitesse fondamentale de flamme entre les limites inférieure et supérieure d'inflammabilité. Ces expériences ont été réalisées uniquement pour les carburants modèles représentatifs du gazole (70% mol de n-décane et 30% mol de 1-méthylnaphtalène) et du B30 (49% mol de *n*-décane, 21% mol de 1-méthylnaphtalène et 30% méthyle octanoate).

Les vitesses ont été mesurées pour une large gamme de richesse, à partir de la limite inférieure d'inflammation (à une condition initiale de 423 K et 1 bar), jusqu'à l'apparition des instabilités de flamme, c'est-à-dire, jusqu'à l'apparition de flammes cellulaires difficilement exploitables.

La détermination de la vitesse spatiale à étirement nul peut être obtenue selon deux méthodes différentes :

- Par approximation du rayon selon une fonction polynomiale où la dérivée de ce rayon en fonction du temps permet d'accéder à la fois à la vitesse spatiale étirée et à l'étirement. Ainsi, en traçant la vitesse spatiale étirée en fonction de l'étirement et par extrapolation à K=0 permet d'en déduire *VS*°.
  Par intégration de la relation (11).

Les deux VS° déduites des deux méthodes ont été tracées en fonction du rapport d'équivalence sur la Figure 111. Comme on peut le voir les deux méthodes donnent des valeurs comparables aux erreurs expérimentales près (±5%).

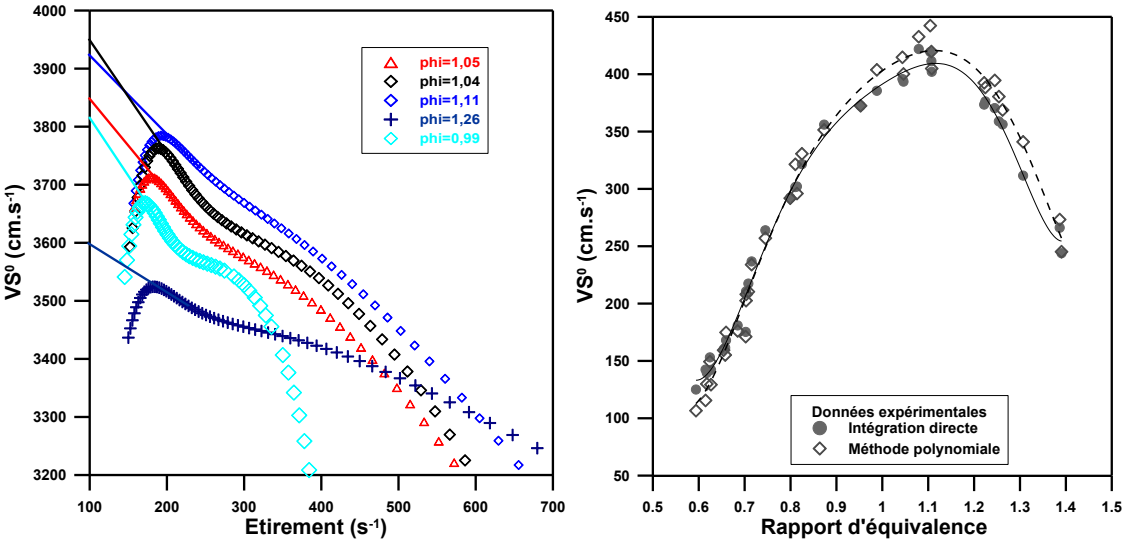


Figure 111. Evolution de la vitesse spatiale de flamme du carburant modèle type gazole en fonction de l'étirement pour quelques rapports d'équivalence.

Par la suite l'intégration directe est privilégiée, car elle permet de réduire considérablement les erreurs sur les longueurs de Markstein (Lamoureux *et al.* 2003).

5.8 Résultats expérimentaux

5.8.1 Conditions expérimentales

Plusieurs séries d'expériences en bombe sphérique ont été réalisées. Tous les hydrocarbures utilisés ont été obtenus auprès de *Sigma-Aldrich :* le *n*-décane (CAS 124-18-5, >99% de pureté), le 1-méthylnaphthalene (CAS 90-12-0, >95% de pureté) et l'octanoate de méthyle (CAS 111-11-5, pureté >99%). Les conditions expérimentales sont présentées dans le tableau suivant.

Tableau 32. Conditions initiales étudiées au cours de ce travail.

Carburant	$P_{initiale}$ *(bar)*	$T_{Initiale}$ *(K)*	X_{Fuel}	X_{O2}	X_{N2}	φ
IDEA-fuel *70% n-décane + 30% 1-méthylnaphtalène*	1 et 4	423	0.0064 à 0.0158	0,209 à 0,203	0,784 à 0,765	0,45 à 2,22
B30 *49% n-décane +21% 1-méthylnaphtalène + 30% octanoate de méthyle*	1 et 4	423	0,0082 à 0,0219	0,208 à 0,205	0,783 à 0,772	0,56 à 1,51

5.8.5 Carburant type IDEA-fuel : 70%mol *n*-décane-30%mol 1-méthylnaphtalène

a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar

Un mélange binaire correspondant au carburant modèle type gazole a été étudié (70%de *n*-décane et 30%d'1-méthylnaphtalène en mol). La combustion de ce mélange a été étudiée dans l'air. La température initiale a été fixée à 423 K. Pour ce mélange, les mesures ont été réalisées pour deux pressions initiales différentes : 1 et 4 bar. Les paramètres expérimentaux de chaque expérience sont présentés en détail sur le Tableau 33.

Tableau 33. Résultats expérimentaux pour le gazole modèle à 1 bar et 423 K. L' : Longueur de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore).

φ	*Sigma*	SL_0 (cm/s)	L' (mm)	P_{max} (bar)	T_F à P_{cste} (K)	PAICC (bar)
0,59	4,41	28,390	1,106	–	1810	5,295
0,61	4,50	31,664	0,843	–	1851	5,392
0,62	4,52	30,857	0,894	5,048	1855	5,418
0,62	4,54	33,706	0,975	–	1867	5,447
0,63	4,57	31,160	0,638	5,040	1872	5,473
0,65	4,68	34,195	0,630	5,123	1921	5,611
0,66	4,70	34,378	0,554	5,293	1928	5,612
0,66	4,72	35,616	0,560	5,299	1931	5,629
0,68	4,83	37,444	0,560	5,433	1975	5,770
0,70	4,92	35,628	0,734	5,239	2004	5,853
0,70	4,92	42,879	0,372	5,631	2006	5,844
0,70	4,92	42,518	0,495	5,639	2007	5,868
0,71	4,93	44,142	0,487	5,623	2016	5,849
0,72	4,97	47,683	0,547	5,689	2026	5,915
0,74	5,10	51,790	0,408	5,775	2075	6,024
0,80	5,31	55,100	0,386	6,075	2158	6,255
0,81	5,36	56,287	0,309	6,043	2173	6,284
0,81	5,37	56,230	0,384	6,098	2178	6,297
0,82	5,42	59,372	0,351	6,082	2192	6,317
0,87	5,56	64,033	0,168	6,220	2253	6,485
0,95	5,83	63,920	0,216	6,417	2325	6,736
0,99	5,90	65,384	0,200	6,439	2348	6,822
1,04	5,98	66,154	0,188	6,539	2368	6,931
1,05	5,99	65,743	0,203	6,495	2369	6,936
1,08	6,04	69,912	0,239	6,643	2370	6,995
1,10	6,05	69,267	0,222	6,655	2366	7,041
1,11	6,04	68,095	0,236	6,615	2367	7,049
1,11	6,04	66,548	0,196	6,621	2366	7,036
1,22	6,05	61,767	0,086	6,705	2307	7,148
1,22	6,03	62,373	0,133	–	2305	7,133
1,24	6,04	61,377	0,107	6,770	2291	7,163

1,25	6,01	59,731	0,119	6,704	2285	7,125
1,26	6,02	59,148	0,060	6,480	2278	7,156
1,31	5,99	52,068	-0,008	6,721	2246	7,144
1,39	5,93	44,897	-0,075	6,732	2188	7,123
1,39	5,91	41,255	-0,145	6,805	2184	7,113
1,70	5,66	16,002	-0,441	6,377	1962	6,890
2,22	5,19	6,900	-0,600	4,012	1614	6,394

A une pression initiale de 1 bar, l'inflammation du mélange combustible, avec une propagation totale, a été obtenue pour des rapports d'équivalence compris entre 0,59 et 2,22. Avec le système d'inflammation utilisé, aucune flamme n'a pu être initiée pour des rapports d'équivalence inférieurs à 0,45.

A partir des expériences réalisées avec ce mélange, nous avons tracé l'évolution de la vitesse spatiale en fonction de la richesse (Figure 112-a) ainsi que celle de la vitesse fondamentale de flamme (Figure 112-c). Nous notons une évolution de ces vitesses selon une forme en cloche. Elles présentent des maxima pour un rapport d'équivalence d'environ 1,08 et qui sont respectivement de 415 $cm.s^{-1}$ et 69,9 $cm.s^{-1}$. Sur la même figure, on peut également observer les longueurs de Markstein extraites en fonction du rapport d'équivalence (Figure 112 b et d). Les deux types de longueurs suivant la même évolution avec l'accroissement du rapport d'équivalence, on note une décroissance à mesure que ce dernier augmente avec un changement de signe pour une richesse critique de 1,31.

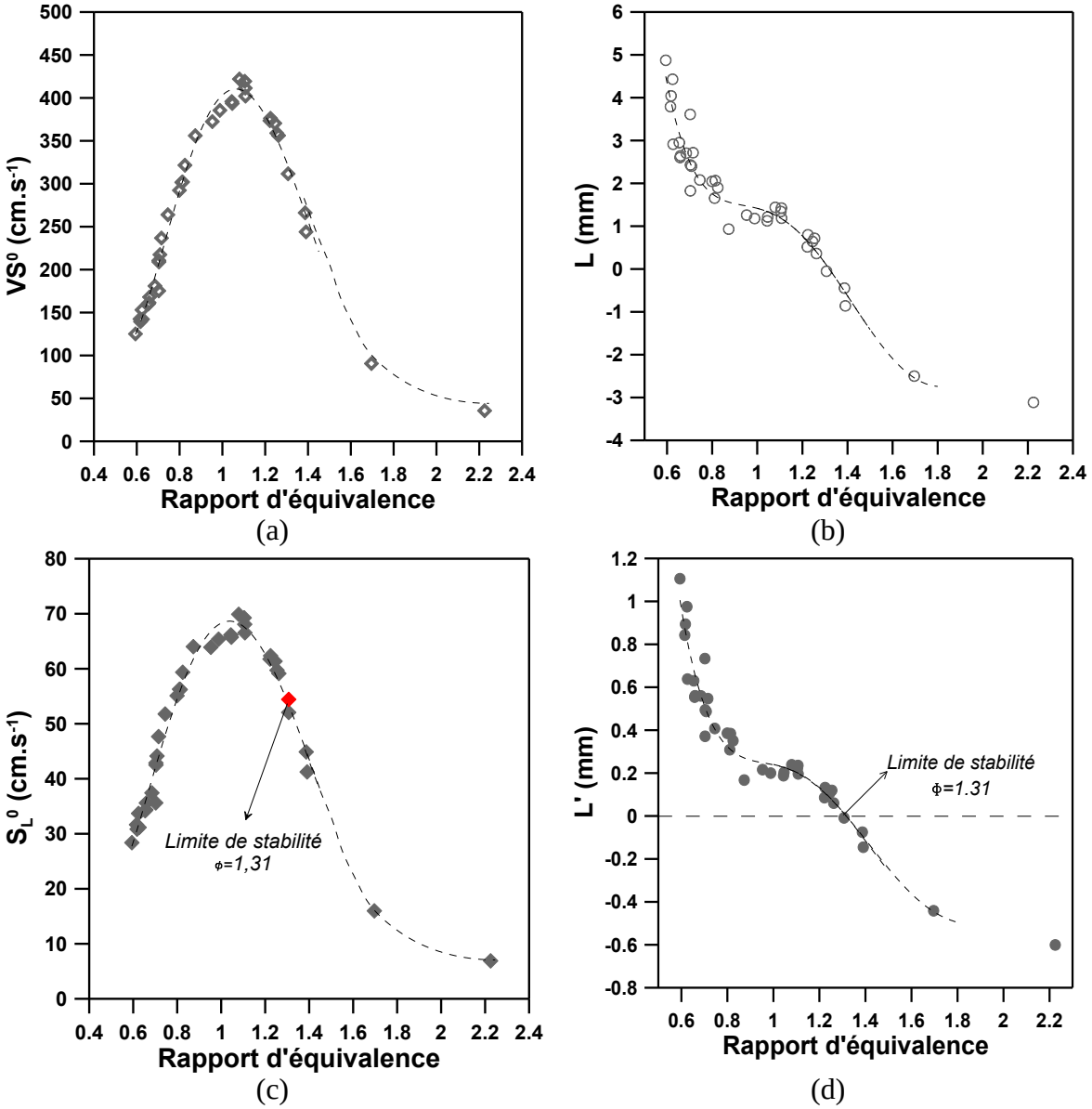


Figure 112. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle gazole / air à 423 K et 1 bar de pression initiale.

Pour un rapport d'équivalence égale à 0,59, la flamme initiée au centre de la bombe se propage à la même vitesse dans toutes les directions donnant naissance ainsi à une flamme sphérique. De plus, elle présente un front bien lisse sans aucun plissement comme on peut le voir sur la Figure 113.

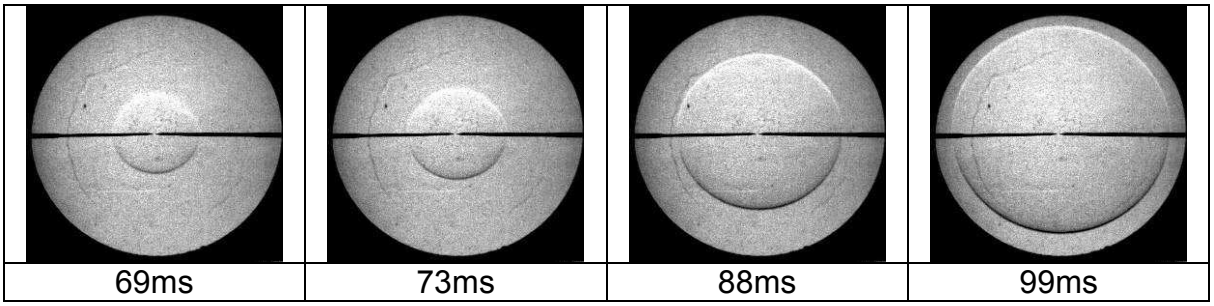
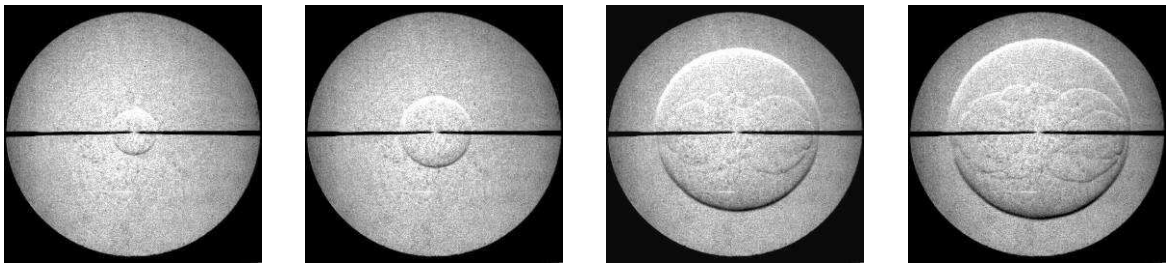


Figure 113. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 0,59.

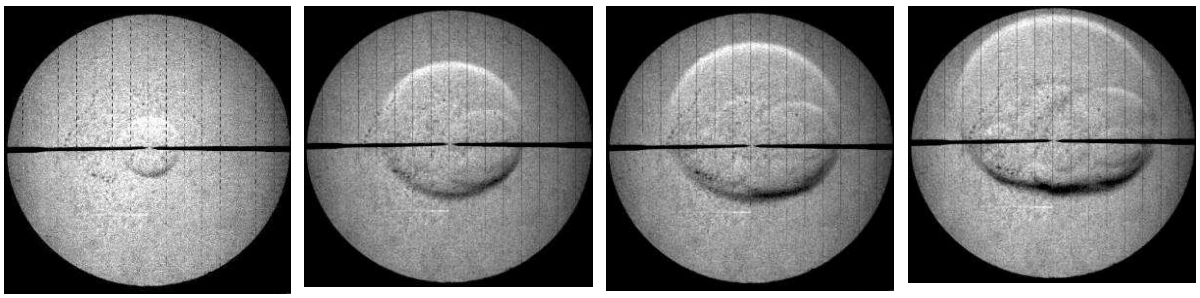
Le même type de flamme est obtenu lorsque le mélange combustible est enrichi en combustible jusqu'à une richesse limite de 1,39. Au-dessus de cette richesse, le plissement de la flamme apparaît comme on peut le voir sur la Figure 114.



30ms 33ms 49ms 53ms

Figure 114. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 1,70.

Ce plissement est d'autant plus important que la richesse est grande, de même, le plissement de la flamme se produira pour des rayons de flamme qui seront d'autant plus petits que la richesse sera élevée. Enfin, lorsque l'on se rapproche de la limite d'inflammabilité supérieure, nous notons une propagation de la flamme qui se fait à une vitesse plus lente dans la direction descendante que dans la direction ascendante en raison des forces de flottabilité qui deviennent plus importantes que les forces inertielles. Ce phénomène est illustré, Figure 115, dans le cas du mélange (0,7/0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène) pour une richesse de 2,22.



29ms 52ms 81ms 96ms

Figure 115. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 2,22.

b) Résultats obtenus à une pression initiale de 4 bar.

Des essais ont été réalisés pour ce même mélange avec une pression initiale plus élevée, soit 4 bar, tout en maintenant la température initiale à 423 K. Les détails des conditions expérimentales se trouvent sur le Tableau 34 ci-dessous.

Tableau 34. Résultats expérimentaux pour le gazole modèle à 4 bar et 423 K. L' : Longueur de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore).

φ	*Sigma*	S_L^0 *(cm/s)*	*L' (mm)*	P_{max} *(bar)*	T_F *(K)*	P_{AICC} *(bar)*
0,59	4,367	16,32	1,982	19,588	1798	21,01
0,62	4,506	17,84	1,054	20,815	1853	21,60
0,62	4,537	16,39	0,842	20,812	1865	21,80
0,62	4,541	17,82	1,201	19,305	1867	21,82
0,64	4,624	23,24	0,864	-	1899	22,19
0,66	4,726	22,50	0,870	21,852	1938	22,66
0,67	4,766	23,15	1,058	21,330	1954	22,84
0,69	4,836	24,26	0,433	22,360	1981	23,16
0,69	4,869	23,37	0,452	22,038	1994	23,30
0,73	5,029	27,63	0,417	23,225	2056	23,99
0,78	5,279	34,24	-0,067	24,226	2146	25,06
0,83	5,467	42,03	-0,155	24,928	2220	25,82
0,84	5,498	42,95	-0,064	-	2227	25,95
0,89	5,672	42,92	0,083	25,081	2294	26,63
0,89	5,677	44,46	0,199	25,372	2296	26,65
0,90	5,720	43,57	0,165	25,368	2306	26,90
0,93	5,820	46,72	0,344	25,843	2340	27,50
0,94	5,862	44,69	0,307	25,876	2354	27,39
0,95	5,895	45,61	0,104	25,889	2364	27,66
0,97	5,957	48,73	0,349	-	2379	27,78
0,99	5,999	48,62	0,041	19,920	2395	27,96
1,01	6,032	48,29	-0,069	26,373	2402	28,11
1,01	6,025	48,81	-0,0760	26,490	2405	28,07
1,04	6,079	48,47	-0,062	26,858	2411	28,35
1,06	6,090	52,39	-0,308	26,713	2413	28,44
1,06	6,106	49,94	-0,037	-	2412	28,54
1,07	6,114	48,14	-0,154	-	2410	28,61
1,08	6,103	50,83	-0,140	26,646	2407	28,59
1,09	6,109	49,41	-0,043	27,168	2404	28,66
1,10	6,137	49,41	-0,227	27,102	2398	28,84
1,11	6,111	49,47	-0,178	27,194	2396	28,74
1,14	6,107	47,32	-0,089	27,196	2382	28,84
1,14	6,133	47,81	-0,189	26,974	2378	28,84

Dans le domaine de composition où il était possible de mesurer la vitesse de propagation de la flamme, on note une augmentation de la vitesse avec celle du rapport d'équivalence (Figure 116). Lorsque ce dernier atteint la valeur de 1,06, la vitesse spatiale (Figure 116a) et fondamentale (Figure 116c) sont maximales : respectivement 317 cm.s^{-1} et

52,38 cm.s^{-1}. Puis au-delà de ce rapport d'équivalence, la vitesse, spatiale fondamentale, de flamme décroît. Ainsi, l'augmentation de la pression initiale de 1 à 4 bar a eu pour effet de diminuer fortement la vitesse fondamentale de flamme maximale qui passe ainsi de 69,91 cm.s^{-1} à 52,38 cm.s^{-1}, soit une réduction d'environ 30 %.

La Figure 116b et d illustre également l'évolution des longueurs de Markstein en fonction du rapport d'équivalence. On note encore une fois une diminution des longueurs de Markstein à mesure que le rapport d'équivalence augmente. Le changement de signe se produit au voisinage du rapport d'équivalence critique de 0,77 indiquant le début de l'apparition des instabilités thermo-diffusives responsables du plissement de la flamme. On peut noter que cette apparition se produit pour un rapport d'équivalence plus faible que celui obtenu à 1 bar.

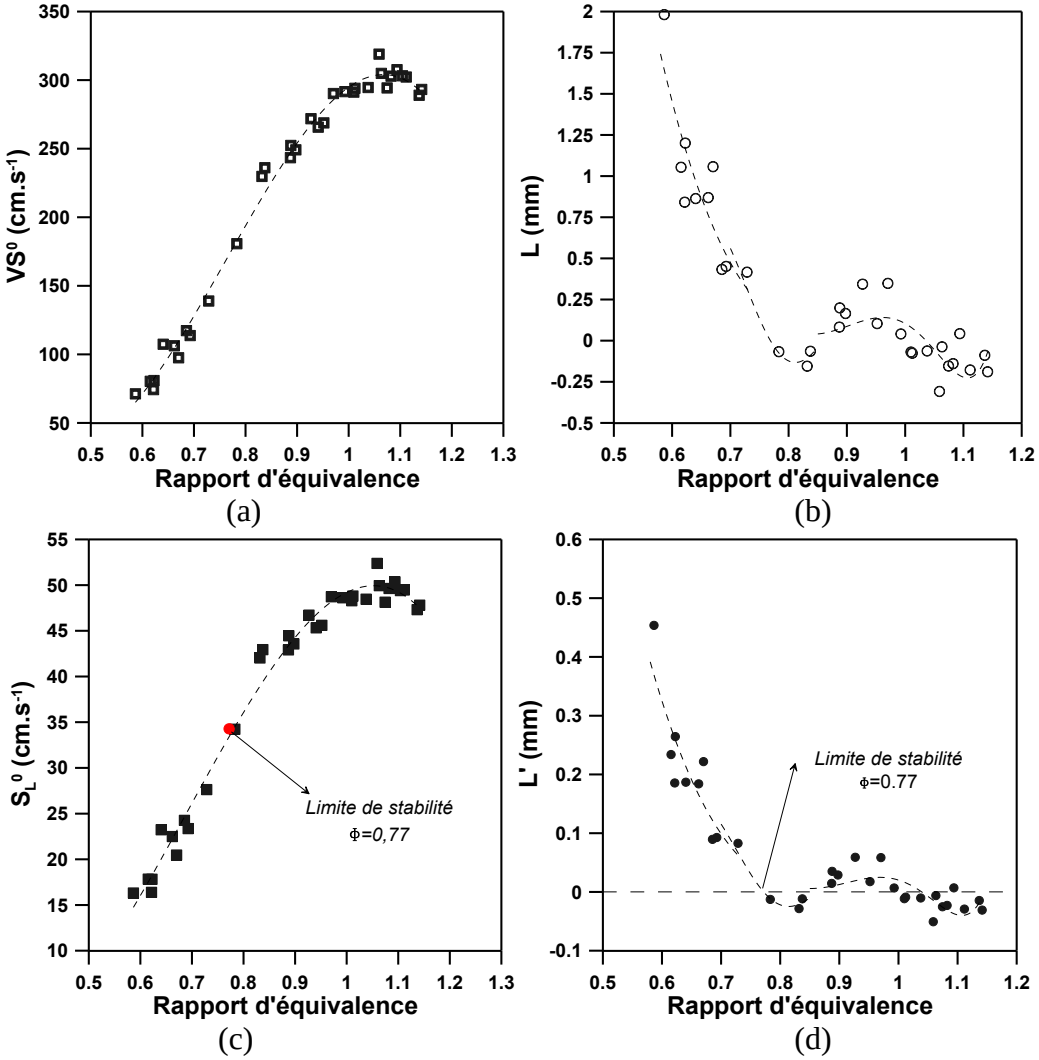
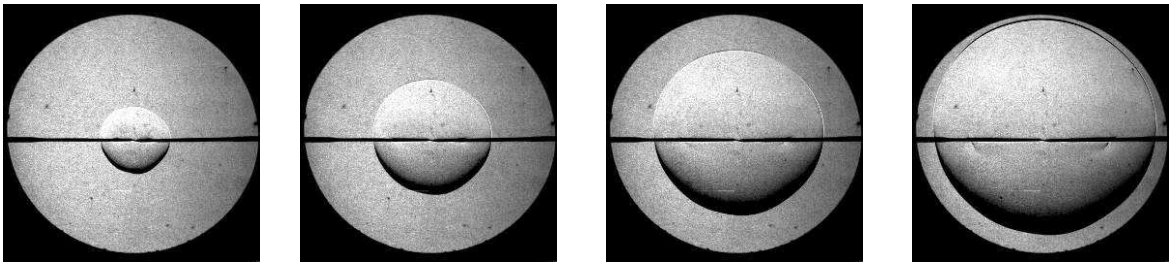


Figure 116. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle gazole / air à 423K et 4 bar de pression initiale.

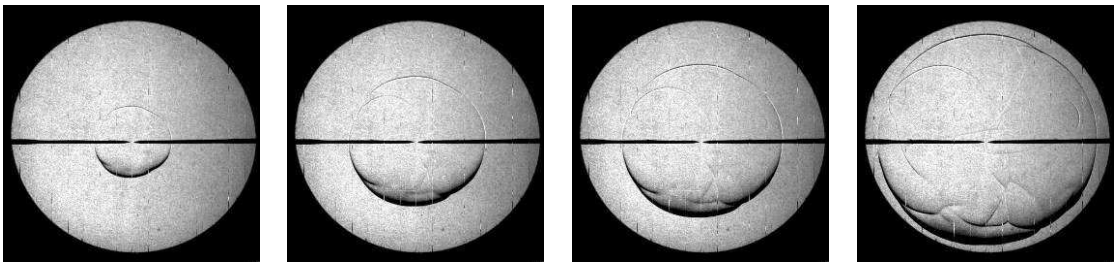
La richesse minimale pour laquelle une inflammation suivie d'une propagation totale a été obtenue est de 0,59 (Figure 117). Par contre, les mesures n'ont pu être réalisées que jusqu'à une richesse de 1,14 en raison de l'apparition précoce des instabilités thermo-diffusives rendant la détermination des vitesses fondamentales de flamme impossible (Figure 119). Ainsi la flamme a présenté une surface de flamme plissée dès un rapport

d'équivalence de 0,73 (Figure 118) même si dans ce cas le plissement est très faible, ce qui n'empêche pas la détermination de la vitesse fondamentale de flamme.



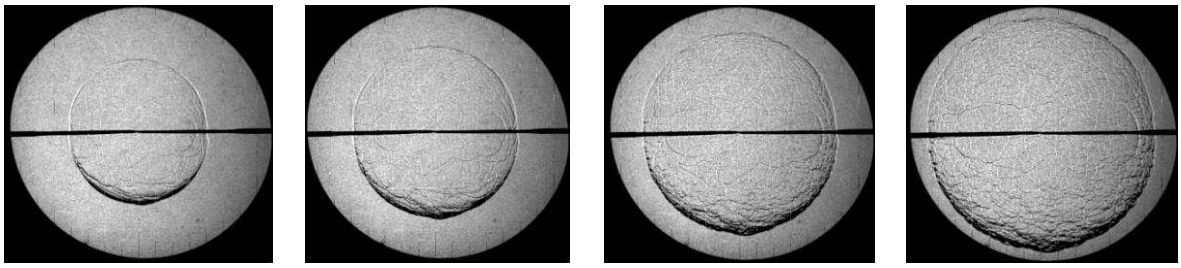
23,17 ms 33,17 ms 49,83 ms 66,50 ms

Figure 117. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,59.



10 ms 18 ms 22 ms 30 ms

Figure 118. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,73.



8,17 ms 9,83 ms 11,49 ms 13,16 ms

Figure 119. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,14.

5.8.6 Carburant modèle type B30: 49%mol n-décane-30%mol octanoate de méthyle-21%mol 1-méthylnaphtalène

a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar

Afin de quantifier l'impact de l'ajout d'un composé oxygéné représentatif des esters méthyliques d'huile végétale sur les vitesses fondamentales de combustion du gazole, nous avons étudié le mélange combustible ternaire correspondant au mélange modèle du gazole auquel nous avons rajouté 30 % en volume d'octanoate de méthyle. Ainsi le combustible ternaire étudié est composé de : 49 % de n-décane, 21 % d'1-méthylnaphtalène et 30 % d'octanoate de méthyle. Comme précédemment, la combustion de ce mélange a été étudiée dans l'air. La température initiale a été fixée à 423 K. Pour ce mélange, les mesures ont été

réalisées pour deux pressions initiales différentes : 1 et 4 bar. Dans le Tableau 35 ci-dessous, les conditions expérimentales utilisées dans ce cas sont présentées.

Tableau 35. Résultats expérimentaux pour le B30 modèle à 1 bar et 423K. L' : longueur de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore)

φ	*Sigma*	S_{L0} *(cm/s)*	*L'* *(mm)*	P_{max} *(bar)*	T_F *à* P_{cste} *(K)*	P_{AICC} *(bar)*
0,61	4,488	32,578	3,867	5,080	1839	5,379
0,63	4,586	37,106	3,924	5,191	1876	5,488
0,63	4,585	36,393	3,611	5,229	1876	5,493
0,70	4,902	43,962	2,620	5,611	1993	5,837
0,70	4,921	45,857	2,544	5,673	2000	5,857
0,79	5,307	51,999	1,449	6,016	2143	6,242
0,82	5,421	57,707	2,078	6,103	2184	6,359
0,84	5,482	54,991	1,985	6,050	2206	6,412
0,85	5,512	57,711	1,436	6,202	2221	6,438
0,91	5,708	62,218	1,474	6,302	2281	6,631
0,92	5,733	62,776	1,519	6,328	2293	6,652
0,94	5,771	62,801	1,198	6,387	2309	6,694
0,95	5,819	62,496	1,198	6,373	2315	6,741
0,97	5,888	66,159	1,268	6,467	2330	6,829
0,98	5,875	65,487	1,406	6,454	2335	6,805
1,03	5,975	65,744	1,139	6,588	2357	6,94
1,05	6,003	65,815	1,220	6,603	2360	6,956
1,07	6,030	66,621	1,119	6,564		7,018
1,07	6,045	65,796	1,152	6,659	2361	7,016
1,10	6,039	66,501	1,015	6,598	2358	7,018
1,11	6,055	66,267	1,090	6,639	2356	7,043
1,12	6,058	66,713	1,137	6,701	2352	7,056
1,15	6,065	64,746	0,804	6,694	2341	7,113
1,20	6,069	64,517	0,176	6,741	2312	7,178
1,20	6,054	62,078	0,482	6,678	2310	7,142
1,21	6,064	62,874	0,973	6,713	2303	7,171
1,24	6,062	60,536	0,871	6,658	2281	7,186
1,30	6,004	54,162	0,182	6,522	2242	7,174
1,36	5,974	51,195	-0,085	6,710	2195	7,163
1,38	5,946	45,034	-0,238	6,558	2180	7,169
1,48	5,885	37,318	-0,899	6,998	2107	7,113
1,48	5,882	36,716	-0,730	6,890	2105	7,111
1,51	5,860	32,747	-1,172	-	2084	7,086
1,51	5,854	31,732	-1,374	6,792	2079	7,081

Les mesures des vitesses de propagation de flamme ont été réalisées pour des rapports d'équivalence compris entre 0,61 et 1,51. Pour des richesses supérieures à 1,51, le plissement important de la flamme ne permettait plus de dériver les vitesses de propagation de flamme. Par contre, côté pauvre, il n'a pas été possible d'enflammer le mélange pour des fractions molaires en hydrocarbure inférieures à 0,009. Comme pour les autres mélanges,

on retrouve l'évolution classique de la vitesse de flamme (spatiale ou fondamentale) en forme de cloche. La vitesse spatiale de propagation de flamme atteint la valeur maximale de 404 cm/s pour un rapport d'équivalence de 1,12 (Figure 120-(a)). La vitesse fondamentale de flamme atteint la valeur maximale de 67 cm/s pour le même rapport d'équivalence (Figure 120-(c)). Nous avons aussi tracé l'évolution des longueurs de Markstein (Figure 120b et d) en fonction du rapport d'équivalence. Encore une fois, on retrouve un comportement comparable à ceux des autres mélanges. Les longueurs sont maximales pour le mélange le plus pauvre, puis elles décroissent avec l'enrichissement du mélange en combustible. Pour une richesse critique de 1,35, on note le changement de signe de cette longueur indiquant l'apparition de la prépondérance des instabilités thermo-diffusives et qui se traduisent par un plissement de la flamme de plus en plus prononcé.

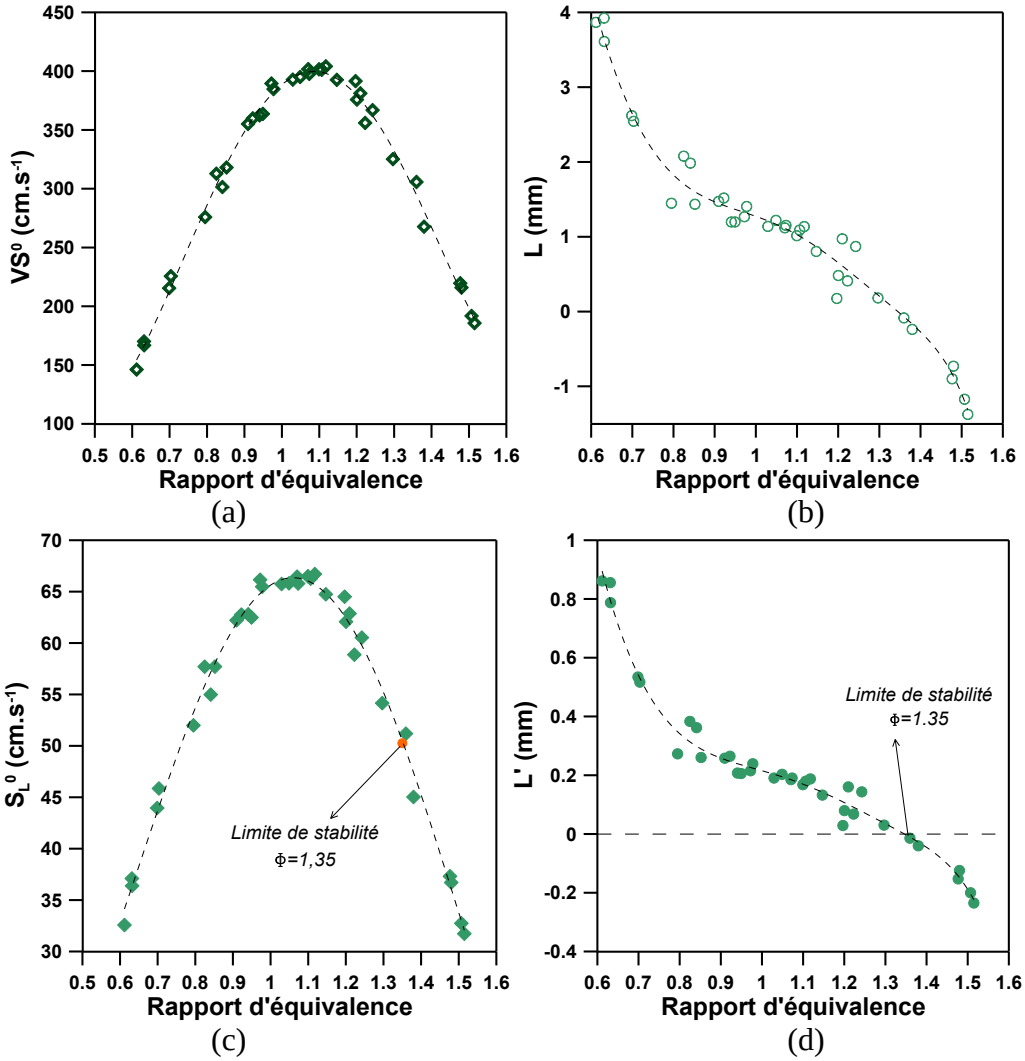
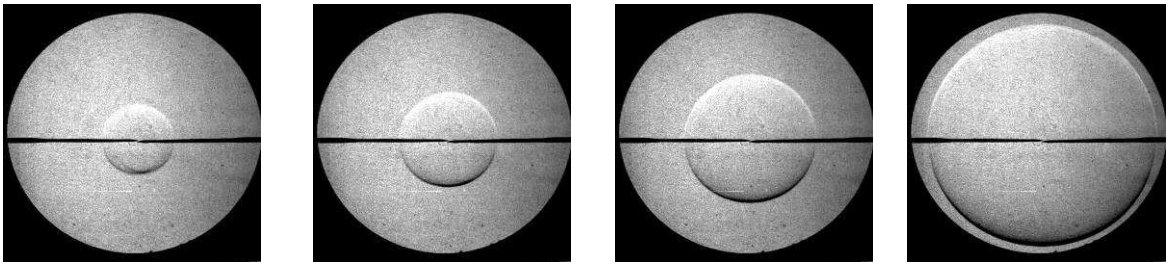


Figure 120. Vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et de la longueur de Markstein (b et d) en fonction de la richesse de B30 modèle/air à 423K et 1 bar.

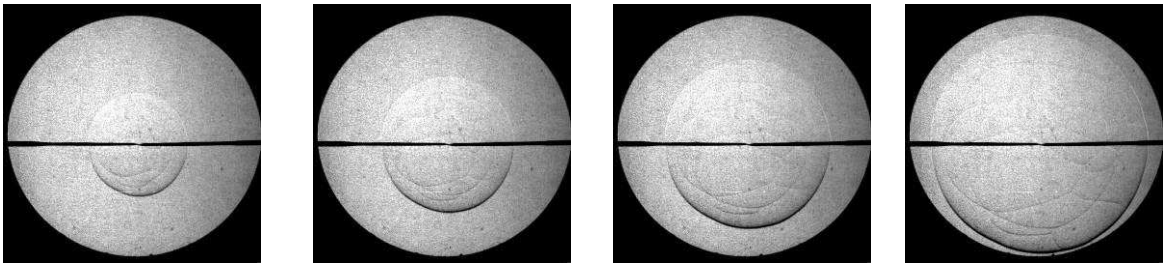
Le domaine de richesse pour lequel une flamme a été obtenue suivie d'une propagation totale est compris entre 0,61 et 1,51. Ainsi, depuis la limite inférieure d'inflammation, soit à φ=0,61 jusqu'au voisinage de 1,15, une flamme sphérique présentant un front lisse est obtenue comme on peut le voir sur la Figure 121.



25ms 31ms 37ms 53ms

Figure 121. Images de la flamme au cours de sa propagation du B30 modèle dans l'air 1 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,61.

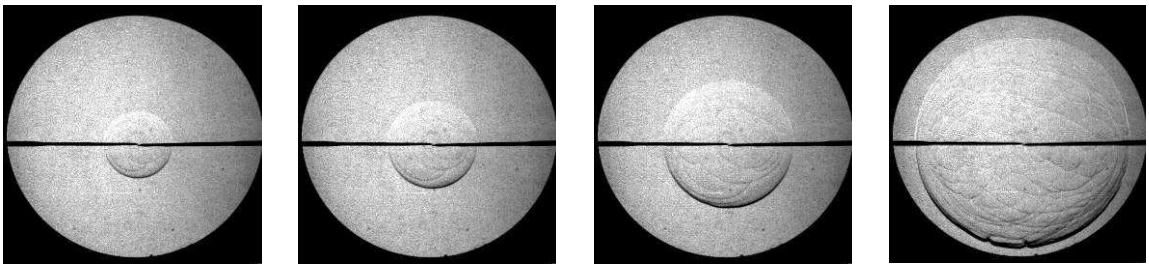
Lorsque le rapport d'équivalence est de 1,22, nous notons l'apparition de cellules de grande dimension qui n'altèrent que très légèrement la surface de la flamme, comme on peut le voir sur la Figure 122.



5ms 7ms 9ms 12ms

Figure 122. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 1 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,22.

Par contre, au-delà, le plissement de la flamme devient d'autant plus important que le rapport d'équivalence est grand. Un exemple du plissement de la flamme est donné sur la Figure 123 pour un rapport d'équivalence de 1,51.



5ms 7ms 10ms 18ms

Figure 123. Images de la flamme au cours de sa propagation dans le cas du B30 modèle dans l'air à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,51.

b) Résultats obtenues à une pression initiale de 4 bar

Comme pour le carburant précédent, on a également mesuré la vitesse fondamentale de flamme pour une température initiale de 423K à 4 bar de pression initiale. Les détails des conditions expérimentales se trouvent sur le Tableau 36.

Tableau 36. Résultats expérimentaux du carburant modèle type B30 à 4 bar et 423K. L' : nombre de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC : combustion adiabatique, isochore.

φ	*Sigma*	S_{L0} (cm/s)	*L'* (mm)	P_{max} (bar)	T_F à P_{cste} (K)	P_{AICC} (bar)
0,62	4,53	19,758	1,442	20,945	1854	21,750
0,72	4,99	26,788	0,840	23,111	2027	23,890
0,74	5,10	31,468	0,681	23,572	2070	24,383
0,77	5,22	34,064	0,522	23,918	2114	24,820
0,78	5,26	35,009	0,562	24,280	2134	24,986
0,84	5,52	39,562	0,389	25,137	2225	26,058
0,89	5,70	42,731	0,279	25,377	2288	26,903
0,97	5,94	47,512	0,186	26,112	2370	27,704
1,02	6,06	49,894	0,240	26,271	2395	28,215
1,04	6,10	50,825	0,388	-	2401	28,435
1,08	6,13	50,278	0,082	26,861	2397	28,690
1,08	6,11	51,369	0,227	26,936	2397	28,635
1,12	6,13	49,801	-0,037	26,951	2378	28,904
1,20	6,10	47,379	-0,224	21,639	2324	29,051

Dans le domaine de composition où la flamme présente une surface lisse voire légèrement plissée, nous avons pu mesurer les vitesses de propagation de flamme, spatiale et fondamentale. Leur évolution en fonction du rapport d'équivalence est reportée sur la Figure 124, (a) pour la vitesse spatiale à étirement nul et (c) pour la vitesse fondamentale à étirement nul. A la limite inférieure, (φ=0,62), les vitesses spatiale et fondamentale de flamme sont respectivement de 89, 4 et 19,8 cm/s. Puis, ces dernières augmentent avec le rapport d'équivalence pour atteindre un maximum, de 314 cm/s pour la vitesse spatiale et 51 cm/s pour la vitesse fondamentale. Ce maximum est obtenu pour un rapport d'équivalence de 1,08.

Les longueurs de Markstein ont aussi été tracées en fonction du rapport d'équivalence, on trouve l'évolution classique, à savoir une décroissance de la longueur de Markstein avec l'enrichissement du mélange en combustible. La limite de stabilité étant observée pour rapport d'équivalence voisin de 0,84 (Figure 124 (c) et (d)).

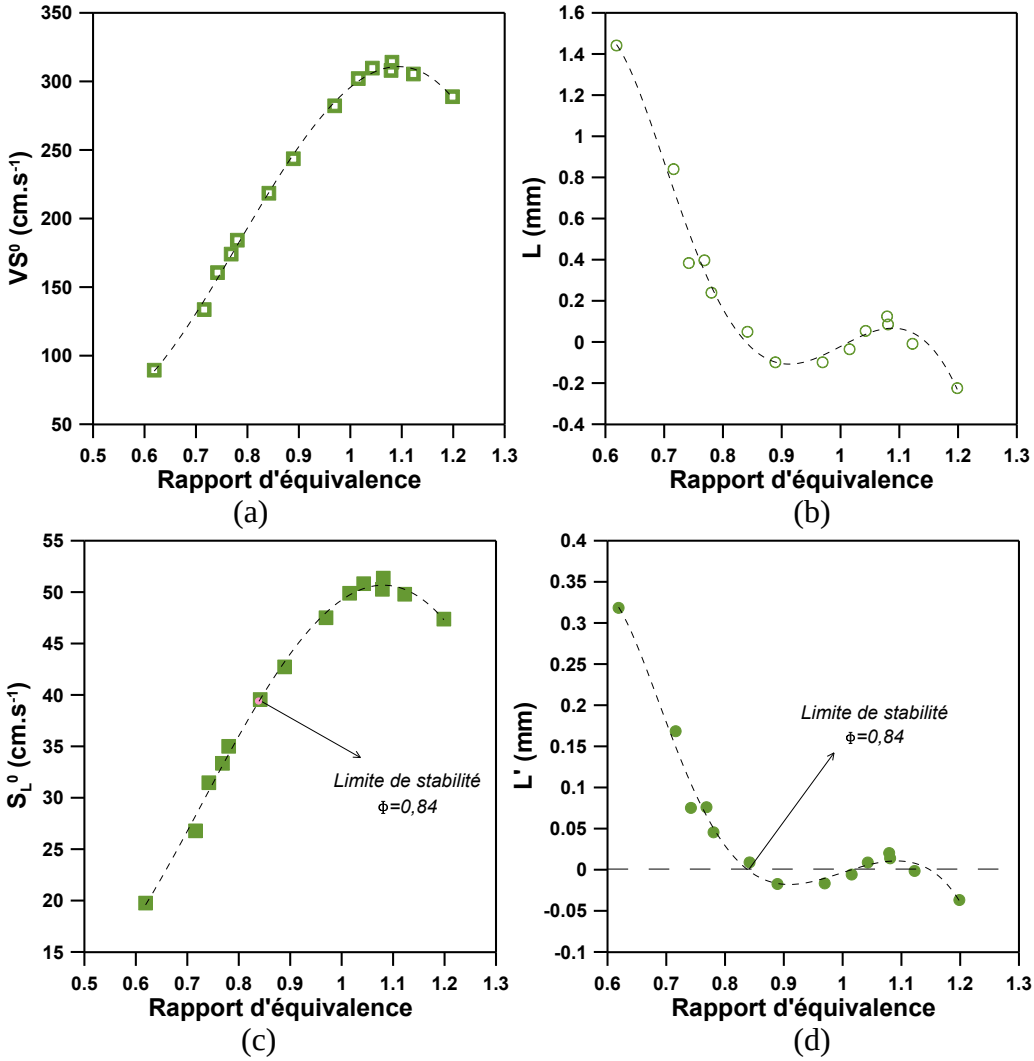
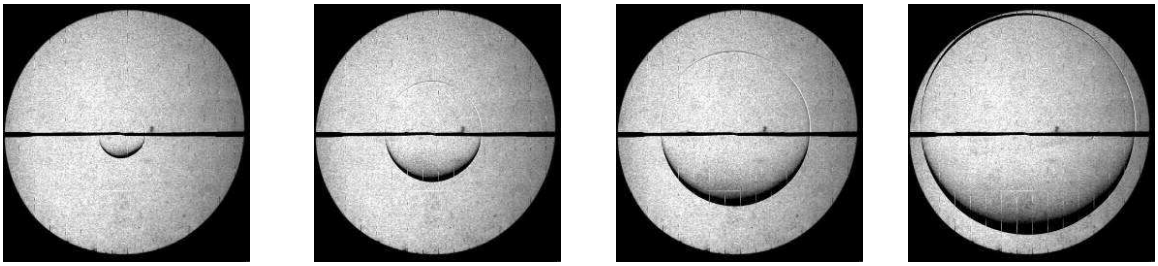


Figure 124. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des B30 modèle / air à 423K et 4 bar.

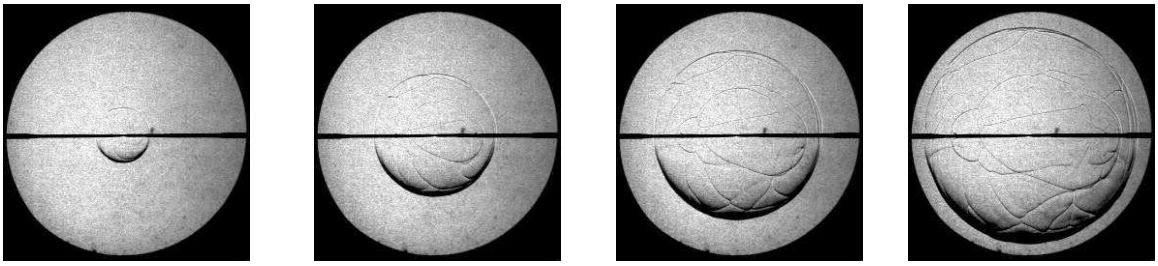
La combustion de ce mélange a aussi été étudiée à une pression initiale de 4 bar et une température initiale de 423 K. La teneur minimale en combustible pour laquelle une flamme a été obtenue est de 0,91 $\%_{mol}$ dans l'air soit φ=0,62. La flamme à cette composition présente une surface lisse comme on peut le voir sur la Figure 125.



16ms 29ms 43ms 59ms

Figure 125. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,62.

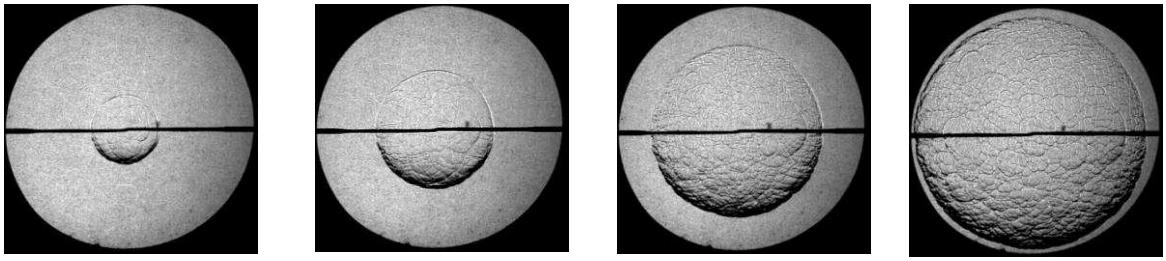
Par contre, lorsque la teneur en combustible est augmentée, le plissement de la flamme apparaît pour des φ≤1 comme on peut le voir sur la Figure 126 qui représente des images de la flamme prises à différents instants, pour un rapport d'équivalence de 0,97 et où les cellules sont bien visibles.



4ms 9ms 12ms 15ms

Figure 126. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,97.

Le plissement de la flamme s'accroît encore avec le rapport d'équivalence jusqu'à être responsable d'un tel accroissement de la surface qu'il devient impossible d'extraire la vitesse fondamentale de flamme à partir de l'enregistrement de sa propagation comme on peut le voir sur la Figure 127 pour le rapport d'équivalence de 1,2.



4ms 9ms 12ms 15ms

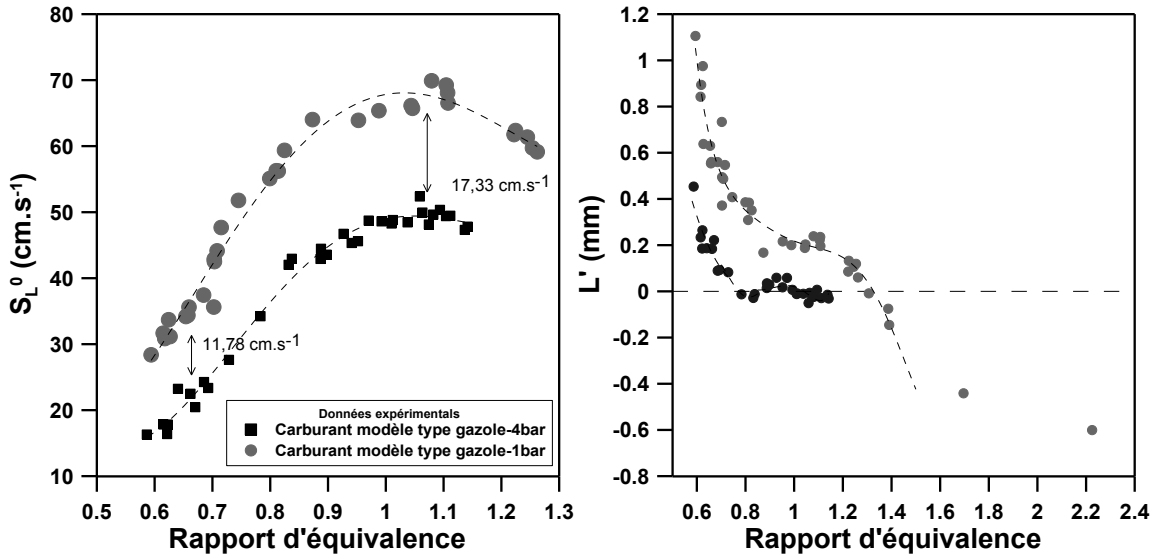
Figure 127. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,2.

5.9 Analyses de résultats

5.9.1 Effet de la pression initiale sur la vitesse de flamme des carburants modèles

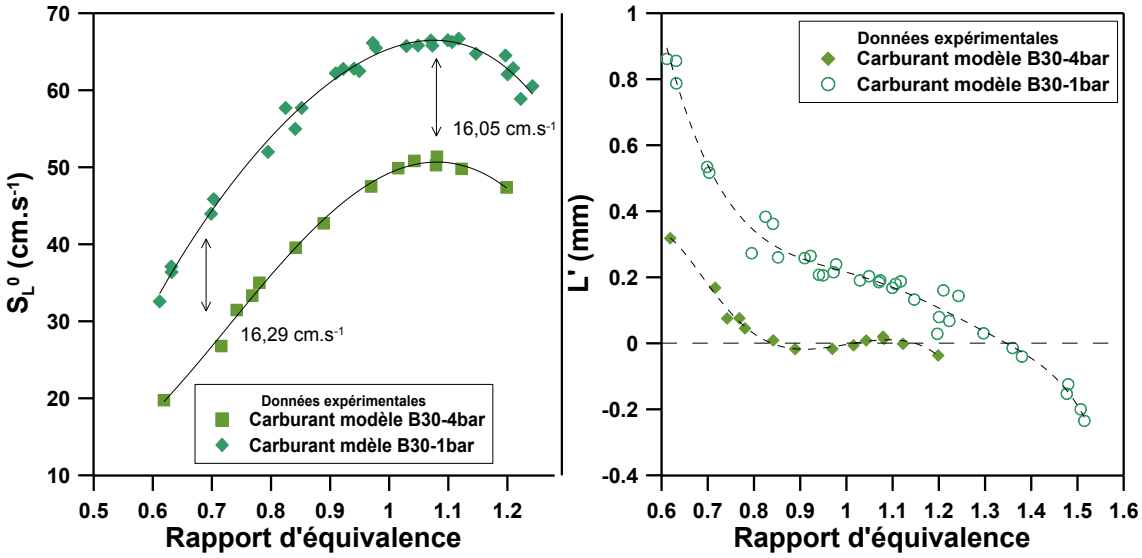
a) Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle gazole

Comme on peut le voir sur la Figure 128, l'augmentation de la pression initiale de 1 à 4 bar a pour résultat une réduction de la vitesse de flamme, spatiale ou fondamentale, ainsi que de la longueur de Markstein sur tout le domaine étudié. On peut noter aussi que l'augmentation de la pression initiale n'a pas induit de modification du rapport d'équivalence pour lequel une flamme est obtenue, mais a eu pour effet de favoriser l'apparition du plissement de la flamme réduisant ainsi le domaine d'études.



(a) (b)

Figure 128. Comparatif entre les évolutions de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul (a) et longueurs de Markstein (b) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle type gazole / air à 423K et 1 et 4 bar de pression initiale.



(a) (b)

Figure 129. Comparatif entre les évolutions de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges de carburant modèle B30 / air à 423K et 1 et 4 bar de pression initiale.

a) Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle B30

La Figure 129-(a) illustre l'impact de l'augmentation de la pression initiale sur la vitesse fondamentale de flamme. On note ainsi que l'augmentation de la pression initiale a pour effet d'abaisser la vitesse fondamentale de flamme sur tout le domaine d'inflammation mais cet effet est plus marqué pour des rapports d'équivalence autour de 1. Ainsi, la vitesse maximale de flamme observée chute de 67 cm/s à 51 cm/s lorsque la pression initiale passe de 1 à 4 bar. Le rapport d'équivalence pour lequel ce maximum est observé est aussi plus

bas (1,08) à 4 bar qu'il ne l'est à 1 bar (1,12). L'augmentation de la pression initiale a aussi un effet sur les longueurs de Markstein qui sont plus faibles à 4 bar qu'elles ne l'étaient à 1 bar (La Figure 129-(b)). De même l'apparition des instabilités thermo-diffusives se fait pour un rapport d'équivalence plus petit à 4 bar (0,9) qu'à 1 bar (1,35).

5.10 Modélisation

Le modèle cinétique détaillé initial développé et validé en JSR (Chapitre 3) est constitué de 7748 réactions réversibles et de 1964 espèces. Ce modèle a été amélioré lors d'une nouvelle validation en tube à choc (chapitre 4) où plus de réactions de croisement et de nouvelles réactions pour l'oxydation d'espèces aromatiques ont été ajoutées. Cette dernière version du modèle est constituée de 7865 réactions réversibles et de 1975 espèces.

L'utilisation d'un grand mécanisme détaillé exige un énorme temps CPU. Ainsi, le principal problème de ces calculs se manifeste par la complexité à résoudre un problème de flamme, combinant les paramètres cinétiques, thermodynamiques et de transport de chaque espèce concernée. Pour cette raison, une réduction du mécanisme de départ a été nécessaire avant d'effectuer les simulations.

5.10.1 Réduction et validation du modèle cinétique d'oxydation

a) Régime à basse température

Le mécanisme de départ développé dans le chapitre précédent a été confronté avec les données expérimentales en tube à choc et JSR. Il s'agit d'un mécanisme robuste validé pour toute la gamme de température qui montre un très bon accord avec les expériences. Cependant, ce mécanisme comprend de nombreuses espèces et réactions pertinentes à l'oxydation à basse température qui sont inutiles pour les simulations de vitesses de flammes qui ne dépendent que des réactions décrivant la cinétique à haute température. Ainsi, la première étape de sa réduction a consisté à enlever les espèces du mécanisme de basse température :

ROO,
QOOH,
O_2QOOH et
HO_2QOOH

Le mécanisme résultant est composé par 408 espèces et 2712 réactions.

b) Régime à haute température-Méthode PFA (path flux analysis)

La deuxième étape de la réduction du mécanisme détaillé a été réalisée en utilisant la méthode de *path flux analysis* (PFA). Une description plus détaillée de la méthode PFA pour la réduction de mécanismes a été publiée par Sun *et al.* 2010, Lu *et al.* 2001 et Gou *et al.* 2010.

La méthode PFA est basée sur la vitesse de réaction absolue en identifiant les voies réactionnelles significatives pour la production et la consommation des premières générations. Ainsi, les coefficients de consommation et de production des espèces A via des espèces B des deux premières générations sont définis comme Sun *et al.* 2010 :

$$r_{AB}^{pro-1st} = \frac{P_{AB}}{\max(P_A, C_A)} \quad \text{et} \quad r_{AB}^{pro-2nd} = \sum_{M_i \neq A,B} (r_{AM_i}^{pro-1st} r_{M_iB}^{pro-1st})$$

$$r_{AB}^{con-1st} = \frac{C_{AB}}{\max(P_A, C_A)} \quad \text{et} \quad r_{AB}^{con-2nd} = \sum_{M_i \neq A,B} (r_{AM_i}^{con-1st} r_{M_iB}^{con-1st})$$

où P_A et C_A correspondent aux taux de production et de consommation des espèces.

La sommation ici comprend tous les chemins (taux) réactionnels possibles se rapportant à A et B. En théorie, différentes valeurs de seuil peuvent être définies pour différents coefficients d'interaction. Pour plus de simplicité, on peut regrouper tous les coefficients d'interaction ensemble pour ne former qu'une seule valeur de seuil :

$$r_{AB} = r_{AB}^{pro-1er} + r_{AB}^{con-1er} + r_{AB}^{pro-2eme} + r_{AB}^{con-2eme}$$

Le coefficient défini ci-dessus est utilisé pour évaluer la dépendance de l'espèce B à l'espèce A. Pour démontrer la stratégie du modèle actuel, un schéma du taux de transfert entre A et B via les autres réactifs *(Mi)* est représenté dans la Figure 130.

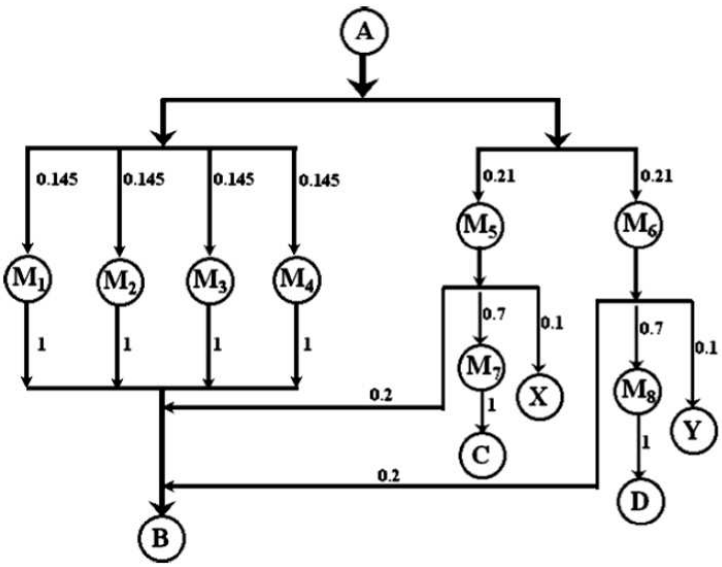


Figure 130. Schéma du taux de transfert entre A et B via les autres réactifs *Mi (* Sun *et al.* 2010).

Le mécanisme résultant est constitué de 1893 réactions réversibles et 245 espèces. Il a été réduit en tenant compte des prédictions des délais d'auto-inflammation du 1-méthylnaphtalène pur, du *n*-décane pur, de l'octanoate de méthyle pur, ainsi que des carburants modèle type gazole et B30. Ce nouveau mécanisme généré ne peut être utilisé

que pour des régimes d'oxydation à haute température (T ≥ 1000K), à différentes richesses et pressions.

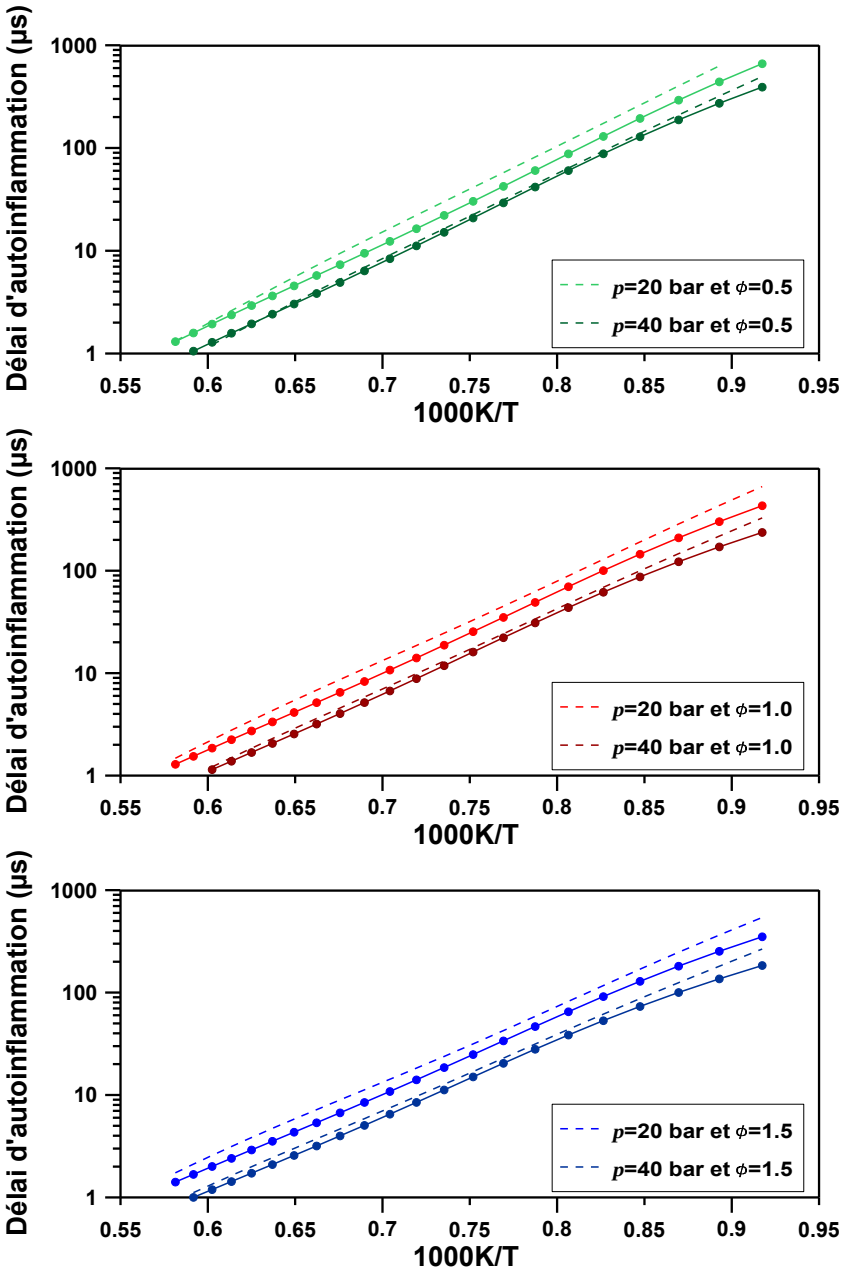


Figure 131. Délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 à haute température. Lignes continues avec des symboles : prédictions du mécanisme détaillé. Lignes en pointillé : prédictions du mécanisme réduit.

Afin de valider le mécanisme réduit, des délais d'auto-inflammation ont été calculés à l'aide de SENKIN Lutz *et al.* 1987. La Figure 131 représente les prédictions des délais d'auto-inflammation du mécanisme détaillé et réduit. On peut observer un accord raisonnable entre les prédictions des deux mécanismes. Toutefois, de légers écarts sont observés en raison de la chimie à basse température supprimée lors de la première étape de la réduction du mécanisme, ce qui confirme son influence significative sur l'oxydation à des régimes de températures plus élevées.

Le mécanisme réduit proposé dans la présente étude est capable de prédire les vitesses de flamme laminaire des carburants modèles gazole et B30. Les calculs de propagation de flammes ont été effectués en utilisant DARS (Digital Analysis of Reaction Systems). DARS est un logiciel commercial pour les calculs des systèmes de cinétique pour des applications en ingénierie.

5.10.2 Confrontation modèle-expérience en bombe sphérique *SF2*

Malgré la réduction du mécanisme, les calculs de vitesse de flamme sont lourds et il n'est pas toujours facile d'obtenir une solution. Ainsi, seulement quelques prédictions ont été obtenues à l'aide de DARS. Les vitesses fondamentales de flamme ont été calculées à 1bar pour le gazole modèle et le B30 modèle.

a) Modélisation des vitesses de flamme n-décane-air

Les vitesses de flamme du *n*-décane mesurées par Kumar *et al.* 2007 et Ji *et al.* 2010 ont été simulées afin de vérifier la validité du mécanisme cinétique proposé ici. Comme on peut le voir sur la Figure 132, le modèle proposé représente raisonnablement les résultats de la littérature.

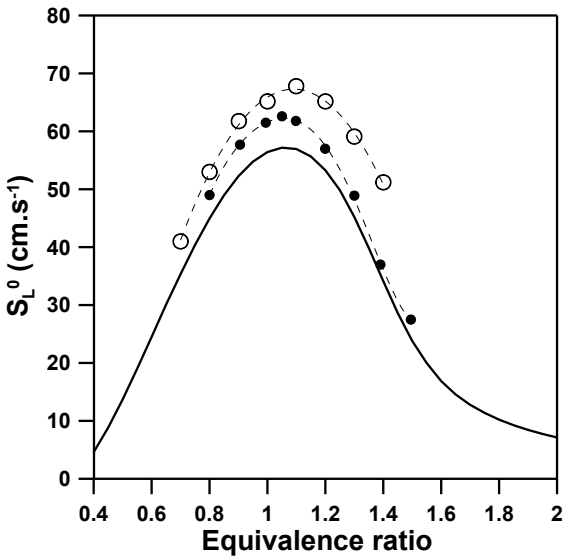


Figure 132. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les vitesses de flamme mesurées par Kumar *et al.* 2007(symboles vides) et Ji *et al.* 2010 (symboles pleins) du n-décane à 1bar et 423 K.

b) Carburant modèle type gazole (IDEA-fuel) dans l'air

Pour le cas du gazole modèle contenant 70% de n-décane +30% du 1-méthylnaphtalène, on a effectué les simulations à 1bar et 423K pour toute la gamme de rapport d'équivalence. Comme le montre la Figure 133 le mécanisme réduction prédit bien les vitesses de flammes avec une erreur maximale de 6,65%.

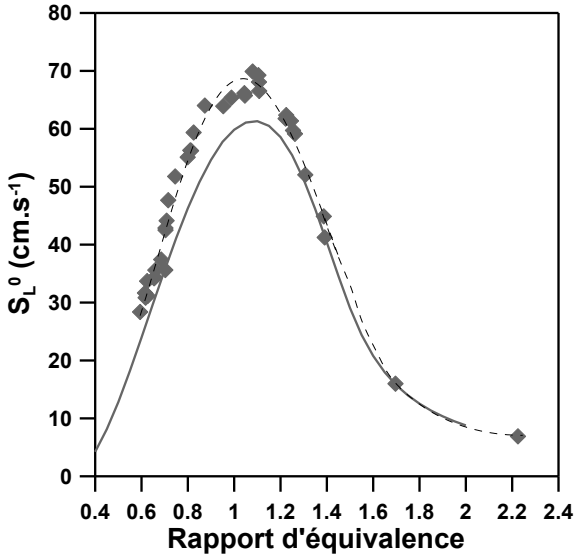


Figure 133. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les expériences (symboles et pointillés) des vitesses de flammes du gazole modèle à 1bar et 423 K.

c) Carburant modèle type B30 dans l'air

De la même façon, pour le cas du B30 modèle composé de 30% d'octanoate de méthyle + 70% de IDEA-fuel en mole, on a choisi de ne simuler que les flammes laminaire à 1bar et 423K pour toute la gamme de rapport d'équivalence. La Figure 134 montre les résultats expérimentaux de vitesses de flamme et ses prédictions dans les mêmes conditions en fonction des rapports d'équivalences.

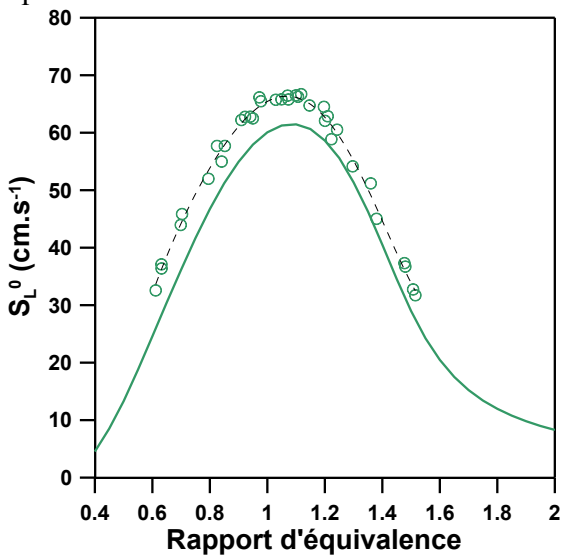


Figure 134. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les expériences (symboles) des vitesses de flammes du carburant modèle B30 à 1bar et 423 K.

Le modèle cinétique prédit les données expérimentales avec une erreur maximale de 6,4%.

Conclusion

Dans cette dernière partie de l'étude, on a mesuré les vitesses fondamentales de combustion pour les carburants modèles de type gazole (70% mol de *n*-décane/ 30% mol d'1-méthylnaphthalène) et de type B30 (49% mol de *n*-décane/ 21% mol d'1-méthylnaphthalène/ 30% mol d'octanoate de méthyle). Ces vitesses fondamentales de flamme ont été mesurées par la technique de la bombe sphérique à deux pressions initiales, i.e., 1 et 4 bar, et à une température initiale fixée à 423K. A partir de ces résultats, on a également déduit la longueur de Markstein et son évolution en fonction de la composition du mélange combustible.

Le mécanisme détaillé (7869 réactions et 1974 espèces) validé précédemment en tube à choc et en JSR a été réduit en utilisant la méthode PFA et en supprimant la la chimie d'oxydation de basse température. Les prédictions obtenues en utilisant ce modèle réduit sont en bon accord avec les vitesses fondamentales mesurées.

Conclusions et perspectives

Les biocarburants jouent un rôle important en contribuant à la carburation de l'automobile d'aujourd'hui et de demain. Une bonne maitrise de leur combustion permettra de proposer une incorporation dans les carburants en plus forte proportion, sans risque et sans modification du moteur .

Les carburants à la pompe sont des mélanges complexes constitués de milliers de molécules. Compte tenu de cette complexité, des carburants modèles peuvent être constitués par une ou deux molécules de chaque famille chimique constituante du carburant (n-paraffines, iso-paraffines, naphtènes et aromatiques), choisies en fonction des propriétés physico-chimiques du carburant à représenter. Dans cette étude, les composés choisis comme carburant modèle pour les mélange gazole/bio-Diesel ont été : le *n*-décane (représentant les n-paraffines), le 1-méthylnaphtalène (représentant les hydrocarbures aromatiques) et l'octanoate de méthyle (représentant les esters méthyliques d'huile végétale).

Les principaux objectifs de cette étude étaient de :

- Proposer des carburants modèles qui pourraient bien représenter les carburants réels de type gazole et B30.

- Modéliser la cinétique d'oxydation et/ou de combustion des ces carburants réels ainsi que de ces carburants modèles, (i) un gazole composé par 30% en mole de 1-méthylnaphtalène et 70% en mole de *n*-décane et (ii) un B30 composé par 21% en mole de 1-méthylnaphtalène, 30% en mole d'octanoate de méthyle et 49% en mole de *n*-décane.

- Fournir plus de résultats expérimentaux pour la validation d'un modèle cinétique d'oxydation de gazole et bi-Diesel grâce aux profils de concentration des espèces intermédiaires et stables mesurés en JSR, de délais d'auto-inflammation mesurés en tube à choc et, enfin, de vitesse de flamme déterminées en bombe sphérique.

Le modèle cinétique proposé dans cette étude a été développé dans un premier temps pour un gazole réel et un carburant modèle de type gazole (70% *n*-decane/30% 1-méthylnaphtalène en mole) dans des conditions diluées (10300 ppm de C) en utilisant un réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) en silice fondu dans une large gamme de conditions opératoires (560-1030 K, 6 et 10 bar, et un intervalle de richesse de 0.25 à 1.5) à un temps de passage fixé. Les résultats de ces expériences, consistant en des profils de concentration des réactifs, des intermédiaires stables et des produits de combustion, ont montré que le gazole réel et son carburant modèle s'oxydent de façon très similaire. Pour une première validation, ce premier schéma cinétique à

montré une concordance raisonnable entre les données expérimentales et les simulations.

Par la suite, l'application du mécanisme cinétique a été étendu à la modélisation de mélanges gazole/bio-Diesel. Pour cette raison, un carburant B30 réel et un carburant modèle composé de 49% de *n*-décane, 30% d'octanoate de méthyle et 21% de 1-méthylnaptalène en mol, ont été oxydés dans un JSR dans les mêmes conditions que pour le gazole (560-1030 K, 6 et 10 bar, $0.25 \leq \varphi \leq 1.5$). Le mécanisme cinétique détaillé était constitué de 7748 réactions impliquant 1964 espèces. Les résultats de la modélisation ont également montré un accord raisonnable entre les résultats des expériences et des modélisations. L'analyse des voies réactionnelles a montré l'importance de la production et la consommation des radicaux OH. La simulation en JSR a montré l'importance des interactions entre les composants primaires des carburants modèles pour l'oxydation à basse température du 1-méthylnaphtalène via des réactions avec des radicaux issus de l'oxydation des constituants du carburant les plus réactifs (*n*-décane et octanoate de méthyle).

Une deuxième validation du modèle a été effectuée en tube à choc, où les délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 ont été mesurés derrière une onde de choc réfléchie à 20 et 40 bar, $0,5 \leq \varphi \leq 1,5$ et $700 \leq T_5 \leq 1200$ K. L'utilisation de ce nouveau modèle a permis d'améliorer les modélisations en JSR et de bien décrire l'évolution des délais d'auto-inflammation en tube à choc dans une large gamme de conditions (de 700 à 1200 K, à 20 et 40 bars et $0,5 \leq \varphi \leq 1,5$). De plus, il a été constaté que le mécanisme proposé prévoit très bien les données expérimentales obtenues antérieurement pour des mélanges de n-décane et de 1-méthylnaphtalène et pour le 1-méthylnaphtalène (Wang *et al.* 2010). Les analyses des voies réactionnelles ont montré l'effet des nouvelles réactions sur la production et la consommation des radicaux OH. La modélisation a aussi montré que les interactions entre les composants du carburant étaient importantes à basse température (par exemple T = 640 K). De plus, un effet plus prononcé à haute température a été observé par rapport aux travaux antérieurs en JSR.

Enfin, une troisième et dernière validation du mécanisme a été effectuée en bombe sphérique où des vitesses fondamentales de flamme ont été mesurées. Les vitesses de flamme du gazole modèle et du carburant modèle B30 ont été mesurées à des pressions initiales de 1 et 4 bar, une température initiale de 423 K et une large gamme de richesse. Les longueurs de Markstein ont également été déterminées pour tous les carburants étudiés. Le mécanisme détaillé, composé de 7869 réactions et 1974 espèces, obtenu lors de la validation en tube à choc, a été réduit en deux temps : (i) d'abord en supprimant la cinétique à basse température et (ii) en utilisant une méthode PFA de Sun *et al.* 2010 pour réduire la cinétique à haute température. Ensuite, ce modèle réduit (1893 réactions réversibles et 245 espèces), seulement valable à haute température a été utilisé pour les simulations. Ce modèle réduit peut décrire avec une bonne concordance les vitesses fondamentales de flamme des deux carburants modèles gazole et B30, ainsi que les vitesses de flamme du *n*-décane mesurées par Kumar *et al.* 2007 et Ji *et al.* 2010.

Les schémas cinétiques détaillés et réduits ont été validés pour une large gamme de données expérimentales : pour l'oxydation de gazole et B30 (carburants modèles et réels) en JSR, des carburants modèles en tube à choc et en bombe

sphérique. Par conséquent, les deux versions du mécanisme proposé (détaillé et réduit) sont appropriés aux prédictions de la cinétique d'oxydation des mélanges de carburants gazole/ bio-Diesel.

Les principales perspectives à ce travail sont :

- L'amélioration des prévisions du modèle pour l'auto-inflammation du gazole et du bio-Diesel

- L'amélioration des prédictions du modèle réduit pour les vitesses de flamme du gazole et du bio-Diesel et l'extension aux pressions élevées.

- L'application du modèle proposé à la modélisation de la combustion dans des moteurs.

Références bibliographiques

Allara, D. L. and R. Shau (1980). "A Compilation of Kinetic Parameters for the Thermal Degradation of n-Alkane Molecules." *J. Phys. Chem.*, **9** (524-559).

Alséda, D. (2007). Contrôle de la combustion en mode HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) par une formulation adaptée du carburant. Laboratoire ICARE. Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**.

Andrae, J., D. Johansson, P. Bjornbom, P. Risberg and G. Kalghatgi (2005). "Co-oxidation in the auto-ignition of primary reference fuels and n-heptane/toluene blends." *Combustion and Flame*, **140** (4): 267-286.

Asaba, T. and N. Fujii (1971). "Shock-tube study of high-temperature pyrolysis of benzene." *Symposium (International) on Combustion*, **13** (1): 155-164.

Bales-Gueret, C., M. Cathonnet, J. C. Boettner and F. Gaillard (1997). "Experimental Study and Kinetic Modeling of Higher Hydrocarbons Oxidation in a Jet-stirred Flow Reactor." *Energy & Fuels*, **6**: 189.

Barths, H., C. Hasse, G. Bikas and N. Peters (2000). "Simulation of combustion in direct injection diesel engines using a eulerian particle flamelet model." *Symposium (International) on Combustion*, **28** (1): 1161-1168.

Barths, H., H. Pitsch and N. Peters (1999). "3D simulation of DI Diesel combustion and pollutant formation using a two-component reference fuel." *Oil & Gas Science and Technology - Revue de L Institut Francais du Petrole*, **54** (2): 233-244.

Basha, S. A., K. R. Gopal and S. Jebaraj (2009). "A review on biodiesel production, combustion, emissions and performance." *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **13** (6-7): 1628-1634.

Battin-Leclerc, F. (2008). "Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates." *Progress in Energy and Combustion Science*, **34** (4): 440-498.

Baulch, D. L., C. J. Cobos, R. A. Cox, P. Frank, G. Hayman, T. Just, J. A. Kerr, T. Murrells, M. J. Pilling, J. Troe, R. W. Walker and J. Warnatz (1994). "Evaluated Kinetic Data for Combustion Modeling Supplement-I." *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **23** (6): 847-1033.

Bénézit, M. (2007). "Les biocarburant chez TOTAL." *IFP:Panorama07*.

Biet, J., M. H. Hakka, V. Warth, P. A. Glaude and F. Battin-Leclerc (2008). "Experimental and modeling study of the low-temperature oxidation of large alkanes." *Energy & Fuels*, **22** (4): 2258-2269.

Bikas, G. and N. Peters (2001). "Kinetic modelling of n-decane combustion and autoignition : Modeling combustion of n-decanem." *Combustion and Flame*, **126** (1-2): 1456-1475.

Bloch-Michel, V. (1995). Logiciel d'estimation de paramètres cinétiques de processus élémentaires en phase gazeuse. Nancy, Institut National Polytechnique de Lorraine.

Cancino, L. R., M. Fikri, A. A. M. Oliveira and C. Schulz (2009). Development and application of detailed chemical kinetics mechanisms for ethanol and ethanol containing hydrocarbon fuels. Mechanical engineering department. Florianopolis, Brazil, University of Santa Catarina. **Ph.D**.

Chang, A. Y., J. W. Bozzelli and A. M. Dean (2000). "Kinetic analysis of complex chemical activation and unimolecular dissociation reactions using QRRK theory and the modified strong collision approximation." *Zeitschrift Fur Physikalische Chemie-International Journal of Research in Physical Chemistry & Chemical Physics*, **214**: 1533-1568.

Cheng, A., A. Upatnieks and C. Mueller (2006). "Investigation of the impact of biodiesel fuelling on NOx emissions using an optical direct injection diesel engine." *International Journal of Engine Research*, **7** (4): 297-318.

Colket, M. B. and D. J. Seery (1994). "Reaction mechanisms for toluene pyrolysis." *Symposium (International) on Combustion*, **25** (1): 883-891.

Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook (1998). "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation." *Combustion and Flame*, **114** (1-2): 149-177.

Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook (2002). "A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation." *Combustion and Flame*, **129** (3): 253-280.

Dagaut, P. (2002). "On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel." *Physical Chemistry Chemical Physics*, **4** (11): 2079-2094.

Dagaut, P. and M. Cathonnet (2006). "The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling." *Progress in Energy and Combustion Science*, **32** (1): 48-92.

Dagaut, P., M. Cathonnet, J. P. Rouan, R. Foulatier, A. Quilgars, J. C. Boettner, F. Gaillard and H. James (1986). "A Jet-Stirred Reactor for Kinetic-Studies of Homogeneous Gas-Phase Reactions at Pressures up to 10-Atmospheres (~ 1 MPa)." *Journal of Physics E-Scientific Instruments*, **19** (3): 207-209.

Dagaut, P., M. Reuillon and M. Cathonnet (1994). "High Pressure Oxidation of Liquid Fuels from Low to High Temperature. 3. n-Decane." *Combust. Sci. Technol.*, **103**: 349.

DARS Software for Digital Analysis of Reactive Systems. Available from: <http://www.diganars.com/>.

Davidson, D. F., D. C. Horning, J. T. Herbon and R. K. Hanson (2000). "Shock tube measurements of JP-10 ignition." *Proceedings of the Combustion Institute*, **28** (2): 1687-1692.

Davidson, D. F., M. A. Oehlschlaeger, J. T. Herbon and R. K. Hanson (2002). "Shock tube measurements of iso-octane ignition times and OH concentration time histories." *Proceedings of the Combustion Institute*, **29** (1): 1295-1301.

Dayma, G., S. Gaïl and P. Dagaut (2008). "Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of Methyl Hexanoate." *Energy & Fuels*, **22** (3): 1469-1479.

Dayma, G., R. A. Glaude, R. Fournet and F. Battinleclerc (2003). "Experimental and modeling study of the oxidation of cyclohexene." *Int J Chem Kinet*, **35** (7): 273-285.

Dayma, G., C. Togbé and P. Dagaut (2009). "Detailed kinetic mechanism for the oxidation of vegetable oil methyl esters:New evidence from methyl heptanoate." *Energy & Fuels*.

Dean, A. J., O. G. Penyazkov, K. L. Sevruk and B. Varatharajan (2007). "Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (2): 2481-2488.

Delfau, J.-L., M. Bouhria, M. Reuillon, O. Sanogo, R. Akrich and C. Vovelle (1991). "Experimental and computational investigation of the structure of a sooting decane-O2-Ar flame." *Symposium (International) on Combustion*, **23** (1): 1567-1572.

Dievart, P. (2008). Oxydation et combustion en milieu ultra-pauvre de carburants types gazole. Étude expérimentale en reacteur agité et modélisation. Optique et lasers – Physico-chimie – Atmosphère Lille, Thèse de Doctorat, Lille 1.

Doute, C., J. L. Delfau and C. Vovelle (1997). "Modeling of the Structure of a Premixed n-Decane Flame." *Combust. Sci. Technol.*, **130**: 269.

Ec2003 (17.5.2003). "Directive 2003/30/EC of the European Parliament and of the Council of 8 May 2003 on the promotion of the use of biofuels or other renewable fuels for transport." *Official Journal of the European Union L 123/42*, **(European Commission, Brussels), http://ec.europa.eu/energy/res/legislation/doc/biofuels/en_final.pdf.**

Ec2009 (28.4.2009). "Directive 2009/28/EC of the European Parliament and of the Council of of 23 April 2009 on the promotion of the use of energy from renewable sources and amending and subsequently repealing Directives 2001/77/EC and 2003/30/EC." *Official Journal of the European Union L 140/16*, **(European Commission, Brussels),** http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2009:140:0088:0113:EN:PDF.

Embouazza, M., D. C. Haworth and N. Darabiha (2002). "Implementation of Detailed Chemical Mechanisms into Multidimensional CFD Using in situ Adaptive Tabulation: Application to HCCI Engines." *SAE paper no.2002-01-2773. Society of Automotive Engineers Inc*.

Emdee, J. L., K. Brezinsky and I. Glassman (1992). "A Kinetic-Model for the Oxidation of Toluene near 1200-K." *Journal of Physical Chemistry*, **96** (5): 2151-2161.

ENERS, E. C. (2009). Production de biocarburants dans le monde. Chifres 2009. P. Biocarburants.

EurObserv'ER (2010). ÉTAT DES ÉNERGIES RENOUVELABLES EN EUROPE. **édition2010**.

Farrell, J. T., N. P. Cernansky, F. L. Dryer, D. G. Friend, C. A. Hergart, C. K. Law, R. M. McDavid, C. J. Mueller, A. K. Patel and H. Pitsch (2007). "Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Diesel Fuels." *SAE International* (2007-01-0201).

Fikri, M., J. Herzler, R. Starke, C. Schulz, P. Roth and G. T. Kalghatgi (2008). "Autoignition of gasoline surrogates mixtures at intermediate temperatures and high pressures." *Combustion and Flame*, **152** (1-2): 276-281.

Fisher, E. M., W. J. Pitz, H. J. Curran and C. K. Westbrook (2000). "Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels." *Symposium (International) on Combustion*, **28** (2): 1579-1586.

Gaïl, S., S. M. Sarathy, M. J. Thomson, P. Diévart and P. Dagaut (2008). "Experimental and chemical kinetic modeling study of small methyl esters oxidation: Methyl (E)-2-butenoate and methyl butanoate." *Combustion and Flame*, **155** (4): 635-650.

Gaïl, S., M. J. Thomson, S. M. Sarathy, S. A. Syed, P. Dagaut, P. Diévart, A. J. Marchese and F. L. Dryer (2007). "A wide-ranging kinetic modeling study of methyl butanoate combustion." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1): 305-311.

Gelfand, B. E. (2000). "APPENDIX A : Laminar and turbulent flame propagation in hydrogen – Air – Steam mixtures ; (Part of : Flame Acceleration and Deflagration to Detonation Transition in Nuclear Safety) " *OECD Nuclear Energy Agency - NEA/CSNI/R(2000)7*.

Glaude, P. A., W. J. Pitz and M. J. Thomson (2005). "Chemical kinetic modeling of dimethyl carbonate in an opposed-flow diffusion flame." *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1): 1111-1118.

Gou, X., W. Sun, Z. Chen and Y. Ju (2010). "A dynamic multi-timescale method for combustion modeling with detailed and reduced chemical kinetic mechanisms." *Combustion and Flame*, **157** (6): 1111-1121.

Griffiths, J. F. and J. A. Barnard (1995). Flame and Combustion. B. A. Professional. Glasgow**:** 94-142.

HadjAli, K., M. Crochet, G. Vanhove, M. Ribaucour and R. Minetti (2009). "A study of the low temperature autoignition of methyl esters." *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1): 239-246.

Hartmann, M., K. Tian, C. Hofrath, M. Fikri, A. Schubert, R. Schießl, R. Starke, B. Atakan, C. Schulz, U. Maas, F. Kleine Jäger and K. Kühling (2009). "Experiments and modeling of ignition delay times, flame structure and intermediate species of EHN-doped stoichiometric n-heptane/air combustion." *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1): 197-204.

Herbinet, O., W. J. Pitz and C. K. Westbrook (2008). "Detailed chemical kinetic oxidation mechanism for a biodiesel surrogate." *Combustion and Flame*, **154** (3): 507-528.

Herbinet, O., W. J. Pitz and C. K. Westbrook (2010). "Detailed chemical kinetic mechanism for the oxidation of biodiesel fuels blend surrogate." *Combustion and Flame*, **157** (5): 893-908.

Herzler, J., M. Fikri, K. Hitzbleck, R. Starke, C. Schulz, P. Roth and G. T. Kalghatgi (2007). "Shock-tube study of the autoignition of n-heptane/toluene/air mixtures at intermediate temperatures and high pressures." *Combustion and Flame*, **149** (1-2): 25-31.

Horning, D. C., D. F. Davidson and R. K. Hanson (2002). "Study of the high-temperature autoignition of n-alkane/O-2/Ar mixtures." *Journal of Propulsion and Power*, **18** (2): 363-371.

Ji, C., E. Dames, Y. L. Wang, H. Wang and F. N. Egolfopoulos (2010). "Propagation and extinction of premixed C5-C12 n-alkane flames." *Combustion and Flame*, **157** (2): 277-287.

Kalscheuer, R., T. Stolting and A. Steinbuchel (2006). "Microdiesel: *Escherichia coli* engineered for fuel production." *Microbiology*, **152**: 2529-2536.

Kiefer, J. H., L. J. Mizerka, M. R. Patel and H. C. Wei (1985). "A shock tube investigation of major pathways in the high-temperature pyrolysis of benzene." *The Journal of Physical Chemistry*, **89** (10): 2013-2019.

Klippenstein, S. J., J. A. Miller and L. B. Harding (2002). "Resolving the mystery of prompt CO2: The HCCO+O2 reaction." *Proceedings of the Combustion Institute*, **29** (1): 1209-1217.

Kumar, K., J. E. Freeh, C. J. Sung and Y. Huang (2007). "Laminar flame speeds of preheated iso-octane/O-2/N-2 and n- heptane/O-2/N-2 mixtures." *Journal of Propulsion and Power*, **23** (2): 428-436.

Kumar, K. and C.-J. Sung (2007). "Laminar flame speeds and extinction limits of preheated n-decane/O2/N2 and n-dodecane/O2/N2 mixtures." *Combustion and Flame*, **151** (1-2): 209-224.

Kuprowicz, N. J., J. S. Ervin and S. Zabarnick (2004). "Modeling the liquid-phase oxidation of hydrocarbons over a range of temperatures and dissolved oxygen concentrations with pseudo-detailed chemical kinetics." *Fuel*, **83** (13): 1795-1801.

Lamoureux, N., N. Djebaïli-Chaumeix and C. E. Paillard (2003). "Laminar flame velocity determination for H2–air–He–CO2 mixtures using the spherical bomb method." *Experimental Thermal and Fluid Science*, **27** (4): 385-393.

Le Cong, T. (2007). Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de combustibles gazeux: méthane, gaz naturel et mélanges contenant de l'hydrogène, du monoxyde de carbone et de l'eau. Oléans, Université d'Orléans. **Dr**.

Litzinger, T. A., K. Brezinsky and I. Glassman ((1985)). Preliminary Experiments with 1-Methylnaphthalene Near 1180 K. presented at The Technical Meeting of The Eastern Section of The Combustion Institue, Fall, Paper # 68.

Lu, T., Y. Ju and C. K. Law (2001). "Complex CSP for chemistry reduction and analysis." *Combustion and Flame*, **126** (1-2): 1445-1455.

Lutz, A. E., R. J. Kee and J. A. Miller (1987). Senkin: A Fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis. SAND87-8248. Livermore, CA, Sandia National Laboratories.

Maas, U. and S. B. Pope (1992). "Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space." *Combustion and Flame*, **88** (3-4): 239-264.

Marchal, A. (1997). Etude de la combustion des familles chimiques constitutives des gazoles à la formation de polluants non réglementés. Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**

Marinov, N. M., W. J. Pitz, C. K. Westbrook, M. J. Castaldi and S. M. Senkan (1996). "Modeling of aromatic and polycyclic aromatic hydrocarbon formation in premixed methane and ethane flames." *Combustion Science and Technology*, **116** (1-6): 211-287.

Mati, K. (2000). Cinétique de combustion du gazole a haute pression: étude expérimentale et modélisation, University of Orléans.

Mati, K., A. Ristori, S. Gaïl, G. Pengloan and P. Dagaut (2007). "The oxidation of a diesel fuel at 1-10 atm: Experimental study in a JSR and detailed chemical kinetic modeling." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (2): 2939-2946.

Mati, K., A. Ristori, G. Pengloan and P. Dagaut (2007). "Oxidation of 1-methylnaphthalene at 1-13 atm: Experimental study in a JSR and detailed chemical kinetic modeling." *Combustion Science and Technology*, **179** (7): 1261-1285.

Metcalfe, W. K., C. Togbé, P. Dagaut, H. J. Curran and J. M. Simmie (2009). "A jet-stirred reactor and kinetic modeling study of ethyl propanoate oxidation." *Combustion and Flame*, **156** (1): 250-260.

Mikolajczak, C. J., M. J. Wornat, F. L. Dryer, O. B. Fringer and T. J. Held (1996). "A flow reactor study of 1-methylnaphtalene pyrolysis using a new condensed species sampling probe." *Chem. Phys. Processes Combust.*, **51**: 183.

Mosconi, J. J. (2006). "Transport: quelles alternatives énergétiques?" *Université TOTAL*.

Muller, C., V. Michel, G. Scacchi and G. M. Come (1995). "THERGAS: A computer program for the evaluation of thermochemical data of molecules and free radicals in the gas phase." *J Chim Phys Phys-Chim Biol*, **92** (5): 1154-1178.

Narayanaswamy, K., G. Blanquart and H. Pitsch (2010). "A consistent chemical mechanism for oxidation of substituted aromatic species." *Combustion and Flame*, **157** (10): 1879-1898.

Oertel, H., Stoßrohre and Springer-Verlag (1966). "New York."

Oilgae (Report 2011). Oilgae Comprehensive Report. Energy from Algae: Products, Market, Processes and Strategies. O. http://www.oilgae.com/ref/report/report.html**:** February 2011.

Olchanski, E. and A. Burcat (2006). "Decane oxidation in a shock tube." *International Journal of Chemical Kinetics*, **38** (12): 703-713.

Osmont, A. (2007). Elaboration d'une méthode théorique de calcul des enthalpies de formation en phase gazeuse et condensée des molécules et radicaux de masse molaire élevée- Application à l'énergétique- Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**.

Palmer, H. B., B. E. Kno and (1961). *ARS J.*, **31**: 826–828.

Pfahl, U. and G. Adomeit (1997). "Self-Ignition of Diesel-Engine Model Fuels At High Pressures." *SAE Technical Paper 970897*, **106** (3).

Pfahl, U., K. Fieweger and G. Adomeit (1996). "Self-ignition of diesel-relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions." *Symposium (International) on Combustion*, **26** (1): 781-789.

Pitsch, H. (1996). "Detailed kinetic reaction mechanism for ignition and oxidation of [alpha]-methylnaphthalene." *Symposium (International) on Combustion*, **26** (1): 721-728.

Prévot, H., V. Hespel, J. Y. Dupré, F. Baratin and D. Gagey (2005). Rapport sur L'optimisation du dispositif de soutien à la filière biocarburants**:** 5-12.

Prieur-Vernat, A. and S. His (2007). "Les biocarburants dans le monde." *IFP:Panorama07*.

Qiao, L., W. Dahm and G. M. Faeth (2008). "Burning Velocities and Flammability Limits of Premixed Methane/Air/Diluent Flames in Microgravity." *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, **AIAA 2008-959**: 1-9.

Ramirez L, H. P., K. Hadj-Ali, P. Diévart, G. Moréac and P. Dagaut (2010). "Kinetics of Oxidation of Commercial and Surrogate Diesel Fuels in a Jet-Stirred Reactor: Experimental and Modeling Studies." *Energy & Fuels*, **24** (3): 1668-1676.

Ranzi, E., P. Gaffuri, T. Faravelli and P. Dagaut (1995). "A wide-range modeling study of n-heptane oxidation." *Combustion and Flame*, **103** (1-2): 91-106.

Reich, L. and S. S. Stivala (1969). "Autoxidation of Hydrocarbons and Polyolefins - Kinetics and Mechanism." *Decker, New York*: 101 - 109.

Ristori, A. (2000). Modélisation de la combustion du gazole étude des aspects chimiques. *Laboratoire ICARE* Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**.

Ristori, A. (2000). Modélisation de la combustion du gazole. Etude des aspects chimiques. Cinétique Chimique. Orléans, Université d'Orléans. **Docteur**.

Sarathy, S. M., S. Gaïl, S. A. Syed, M. J. Thomson and P. Dagaut (2007). "A comparison of saturated and unsaturated C4 fatty acid methyl esters in an opposed flow diffusion flame and a jet stirred reactor." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1): 1015-1022.

Sato, K. and Y. Hidaka (2000). "Shock-tube and modeling study of acetone pyrolysis and oxidation." *Combust Flame*, **122** (3): 291-311.

Schönborn, A. (2009). Influence of the molecular structure of biofuels on combustion in a compression ignition engine. Department of Mechanical Engineering. London, University College London. **Doctor of Philosophy**.

Schönborn, A., N. Ladommatos, J. Williams, R. Allan and J. Rogerson (2009). "The influence of molecular structure of fatty acid monoalkyl esters on diesel combustion." *Combustion and Flame*, **156** (7): 1396-1412.

Scott, M. and R. W. Walker (2002). "Addition of toluene and ethylbenzene to mixtures of H-2 and O-2 at 773 K - Part I: Kinetic measurements for H and HO2 reactions with the additives and a data base for H abstraction by HO2 from alkanes, aromatics and related compounds." *Combustion and Flame*, **129** (4): 365-377.

Shaddix, C. R., K. Brezinsky and I. Glassman (1997). "Analysis of fuel decay routes in the high-temperature oxidation of 1-methylnaphthalene." *Combustion and Flame*, **108**: 139-157.

Silke, E. J., W. J. Pitz, C. K. Westbrook and M. Ribaucour (2007). "Detailed chemical kinetic modeling of cyclohexane oxidation." *Journal of Physical Chemistry a*, **111** (19): 3761-3775.

Siva Kumara, A., D. Maheswarb and V. K. Reddyc (2009). "Comparision of Diesel Engine Performance and Emissions from Neat and ransesterified Cotton Seed Oil." *Jordan Journal of Mechanical and Industrial Engineering*, **3** (3): 190-197.

Skjoth-Rasmussen, M. S., M. Braun-Unkhoff, C. Nauman and P. Frank (2003). "Experimental and numerical study of n-decane chemistry." *Proceedings of the European Combustion Meeting*.

Su, W. and H. Huang (2005). "Development and calibration of a reduced chemical kinetic model of n-heptane for HCCI engine combustion." *Fuel*, **84** (9): 1029-1040.

Sun, W., Z. Chen, X. Gou and Y. Ju (2010). "A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms." *Combustion and Flame*, **157** (7): 1298-1307.

Tang, Q. and S. B. Pope (2002). "Implementation of combustion chemistry by in situ adaptive tabulation of rate-controlled constrained equilibrium manifolds." *Proceedings of the Combustion Institute*, **29** (1): 1411-1417.

The Royal Society (2008). *Sustainable biofuels: prospects and challenges*. T. b. T. C. P. Ltd. Cardiff, UK, **:** 35-36.

Togbé, C., J. B. May-Carle, G. Dayma and P. Dagaut (2009). "Chemical Kinetic Study of the Oxidation of a Biodiesel−Bioethanol Surrogate Fuel: Methyl Octanoate−Ethanol Mixtures†." *The Journal of Physical Chemistry A*, **114** (11): 3896-3908.

Tsang, W. (1978). "Evidence for Strongly Temperature-Dependent a Factors in Alkane Decomposition and High Heats of Formation for Alkyl Radicals." *International Journal of Chemical Kinetics*, **10** (8): 821-837.

Tsang, W. (1988). "Chemical Kinetic Data-Base for Combustion Chemistry .3. Propane." *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **17** (2): 887-952.

Vanhove, G., R. Minetti, S. Touchard, R. Fournet, P. A. Glaude and F. Battin-Leclerc (2006). "Experimental and modeling study of the autoignition of 1-hexene/isooctane mixtures at low temperatures." *Combustion and Flame*, **145** (1-2): 272-281.

Vasudevan, V., D. F. Davidson and R. K. Hanson (2005). "Shock tube measurements of toluene ignition times and OH concentration time histories." *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1): 1155-1163.

Wang, H., S. J. Warner, M. A. Oehlschlaeger, R. Bounaceur, J. Biet, P.-A. Glaude and F. Battin-Leclerc (2010). "An experimental and kinetic modeling study of the autoignition of [alpha]-methylnaphthalene/air and [alpha]-methylnaphthalene/n-decane/air mixtures at elevated pressures." *Combustion and Flame*, **157** (10): 1976-1988.

Warth, V., N. Stef, P. A. Glaude, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi and G. M. Come (1998). "Computer-Aided Derivation of Gas-Phase Oxidation Mechanisms: Application to the Modeling of the Oxidation of n-Butane." *Combustion and Flame*, **114** (1-2): 81-102.

Yahyaoui, M. (2005). Étude cinétique de la formation de polluants à partir de mélanges représentatifs des essences, Université d'Orléans.

Yahyaoui, M., N. Djebaili-Chaumeix, P. Dagaut, C. E. Paillard and S. Gail (2007). "Experimental and modelling study of gasoline surrogate mixtures oxidation in jet stirred reactor and shock tube." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1): 385-391.

Yahyaoui, M., N. Djebaili-Chaumeix, P. Dagaut, C. E. Paillard, B. Heyberger and G. Pengloan (2007). "Ignition and oxidation of 1-Hexene/Toluene mixtures in a shock tube and a jet-stirred reactor: Experimental and kinetic modeling study." *International Journal of Chemical Kinetics*, **39** (9): 518-538.

Zabarnick, S. (1993). "Chemical kinetic modeling of jet fuel autoxidation and antioxidant chemistry." *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **32** (6): 1012-1017.

Zabarnick, S. (1998). "Pseudo-Detailed Chemical Kinetic Modeling of Antioxidant Chemistry for Jet Fuel Applications." *Energy & Fuels*, **12** (3): 547-553.

Zeppieri, S. P., S. D. Klotz and F. L. Dryer (2000). "Modeling Concepts for Larger Carbon Number Alkanes: a Partially Reduced Skeletal Mechanism for n-Decane Oxidation and Pyrolysis." *Twenty-Eighth Symposium (International) on Combustion.*: 1587.

Zhang, H. X., S. I. Ahonkhai and M. H. Back (1998). "Rate constants for abstraction of hydrogen from benzene, toluene, and cyclopentane by methyl and ethyl radical over the temperature range 650-770 K." *Can. J. Chem.*, **67**: 1541.

Zhang, Y., Y. Yang and A. L. Boehman (2009). "Premixed ignition behavior of C9 fatty acid esters: A motored engine study." *Combustion and Flame*, **156** (6): 1202-1213.

Zhao, Z. W., J. Li, A. Kazakov, F. L. Dryer and S. P. Zeppieri (2005). "Burning velocities and a high-temperature skeletal kinetic model for n-decane." *Combustion Science and Technology*, **177** (1): 89-106.

Zhukov, V. P., V. A. Sechenov and A. Y. Starikovskii (2008). "Autoignition of n-decane at high pressure." *Combustion and Flame*, **153** (1-2): 130-136.

Annexe 1

Nomenclature methodology

In this study, the nomenclature used for the oxidation mechanism of n-alkanes follows the same methodology adopted by Diévart *et al.* [1]. It consists to give to each carbon atom of the starting molecule a letter (written in capitals) and a number to each carbon-carbon bond. Some examples for the case of *n*-decane are represented above (Fig. 1). Then each function or functional group was represented in most of cases by a letter or group of letters (lower case), as used by Curran [2]. Some examples of this nomenclature are shown in Table 1 for clarity.

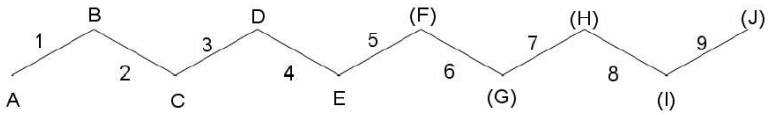
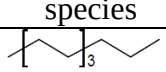
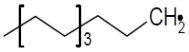
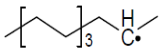
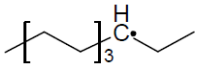
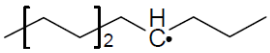
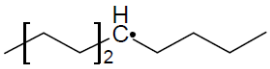
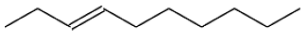
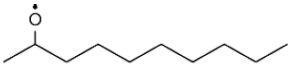
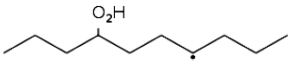
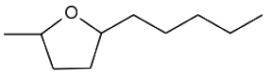
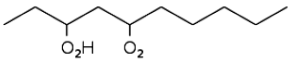
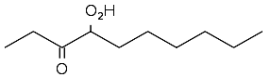


Fig. 1. Example of the nomenclature used in this kinetic mechanism for *n*-decane.

Table 1. Nomenclature for radicals obtained from *n*-decane oxidation.

Name	species
nc10h22	
Ac10h21	
Bc10H21	
Cc10h21	
Dc10h21	
Ec10h21	
c10h20-3	
c10h21ojB	
c10h20rGqD	
c10h20o-BE	
c10h20qjEqC	
c10h19oCqD	

The nomenclature used for the oxidation of methyl esters follows that adopted by Fischer *et al.* [3] and Dayma *et al.* [4]. Thus, the methodology consists to give to each carbon of the molecule a number (Fig. 2). The position of a radical is denoted by the position of radical

(carbon atom) followed by "j". Some examples of species obtained from methyloctanoate oxidation are given in Table 2. The same methodology was used for all methyl esters studied.

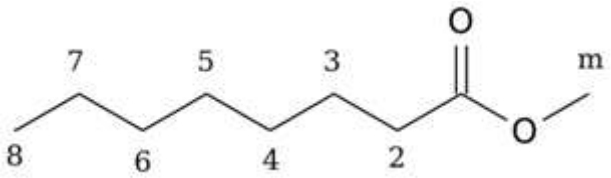
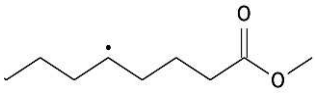
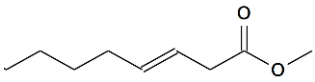
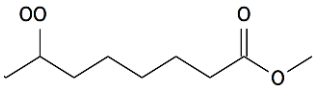
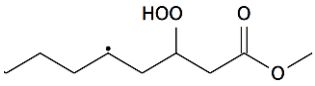
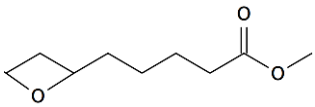
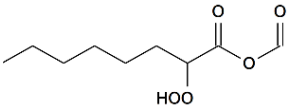


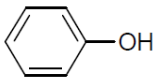
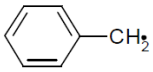
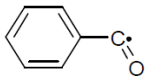
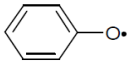
Fig. 2. Example of the nomenclature used in this kinetic mechanism for methyloctanoate.

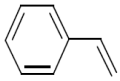
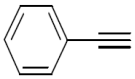
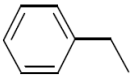
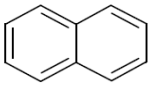
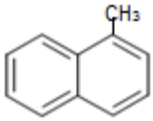
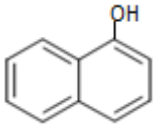
Table 2. Nomenclature for radicals obtained from methyl octanoate oxidation.

Name	Species
mo5j	
mo3d	
mo7oo	
mo3ooh5j	
mocy8o6	
mo2oohm*o	

Concerning the nomenclature used for aromatic species, we follow the methodology of Mati *et al.*[5], which consists to use the name of the molecule or functional group. Some examples are given in the Table 3.

Table 3. Some examples of aromatic species used in this work.

Name	species
c6h6	
c6h5oh	
phch2	
phco	
c6h5o	

STYREN	
phc2h	
phc2h5	
napht	
c10h7ch3	
A2oh	

References

1. Dievart, P. Oxydation et combustion en milieu ultra-pauvre de carburants types gazole. Étude expérimentale en reacteur agité et modélisation. Université de Lille 1, Lille, 2008.
2. Curran, H. J.; Gaffuri, P.; Pitz, W. J.; Westbrook, C. K., A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation. *Combust. Flame* **2002,** *129* (3), 253-280.
3. Fisher, E. M.; Pitz, W. J.; Curran, H. J.; Westbrook, C. K., Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. *Proc. Combust. Inst.* **2000,** *28*, 1579-1586.
4. Dayma, G.; Gail, S.; Dagaut, P., Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate. *Energy Fuels* **2008,** *22* (3), 1469-1479.
5. Mati, K.; Ristori, A.; Pengloan, G.; Dagaut, P., Oxidation of 1-methylnaphthalene at 1-13 atm: Experimental study in a JSR and detailed chemical kinetic modeling. *Combust. Sci. Technol.* **2007,** *179* (7), 1261-1285.

Annexe 2

Mécanisme cinétique

```
!*****************************************************
!*!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!*
!*!!          mécanisme d'oxydation du            !!!*
!*!!n-décane - 1-methylnaphtalene-Methyl Octanoate !!!*
!*!!            RAMIREZ DIEVART TOGBE             !!!*
!*!!                   ICARE                      !!!*
!*!!                Octobre 2011                  !!!*
!*!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!*
!*****************************************************

ELEMENTS
c/12.012/
h/1.00797/
o/15.9994/
N/14.0067/
AR/39.9500/


SPECIES

!espèces dosées
o2          co          co2         h2          h2o
ch4         c2h6        c2h4        c3h6        c4h8
c5h10       c6h12-1     c7h14-1     c8h16-1     c9h18-1
c10h20-1    c11h22      c12h24-1
c3h8        c4h10       nc5h12      c6h14       nc7h16
nc8h18      nc9h20      nc10h22     nc11h24     nc12h26
c2h2        c4h6        ac3h4       pc3h4
ch2o        ch3hco      ethco       acrol       nc3h7hco
nc4h9hco    c5h11hco    c6h13hco    aceton      mvk
c2h5coc2h3
ch3oh       c2h5oh      c2h4o

c6h6        toluen      phc2h5      styren      c6h5oh
phhco
c5h4oh      c5h4o       c2h4o       napht       CPD

c10h20o-AD  c10h20o-BE  c10h20o-CF
c10h20o-DG  c10h20o-AB  c10h20o-BC  c10h20o-CD  c10h20o-DE
c10h20o-EF  c10h20o-AC  c10h20o-BD  c10h20o-CE  c10h20o-DF
c10h20o-AE  c10h20o-BF  c10h20o-CG
c10h20-2    c10h20-3    c10h20-4    c10h20-5

cyc6h12     cyc6h10     mche1       chxone      chxe2oA
chxe3oA     che24one
c10h7ch3    c10h7hco    indene  mp2d   mb      mb2d
mb3d
mpe     mpe4d   mpe3d   mpe2d
mhx     mhx5d   mhx4d   mhx3d   mhx2d
mhp     mhp6d   mhp5d   mhp4d   mhp3d   mhp2d
mo      mo7d    mo6d    mo5d    mo4d    mo3d
mo2d
mo8*o   mhp7*o  mhx6*o  mpe5*o  mb4*o   mp3*o   me2
*o

! Base C0
h           o2          h           o           oh
ho2         h2o         h2o2
n2          ar

! Base C1

co          co2
ch4         ch3         ch2         sch2        ch
```

```
C
ch3oh       ch3o        ch2oh       ch2o        hco
ch3o2       ch3o2h      o2cho       ho2cho      ocho

! Base c2

c2h6        c2h5        c2h4        c2h3        c2h2
c2h         c2          c2o
ch3hco      ch3co       ch2hco      ch2co       hcco
ch3co2      ch3co3      ch3co3h
c2h5oh      c2h5o       c2h5o2      c2h5o2h
c2h4o       c2h4o2h     c2h2oh
hccoh       chocho      choco       c2h3o
pc2h4oh     o2c2h4oh    ch3choh


! Base C3

c3h8        nc3h7       ic3h7
c3h6        ac3h5       tc3h5       sc3h5
pc3h4       ac3h4       c3h3        c3h2
nc3h7o      nc3h7oh     nc3h7o2     nc3h7o2h
ic3h7o      ic3h7o2     ic3h7o2h
c3h6ooh1-2  c3h6ooh1-3  c3h6ooh2-1  c3h6ooh1-1
c3h6ooh1-2o2 c3h6ooh1-3o2 c3h6ooh2-1o2 c3h6ooh1-1o2
c3ket12     c3ket13     c3ket21
c3h6o       c3h6o1-3    c3h5o
c3h4oh      c3h4o2h     c3h4o       c3h3o
c3h5o2h     c3h5e1q2
ethco       c2h5co      c2h5co3     c2h5co3h    c2h5co2
aceton      acrol       c2h3co      ch2coch3
c3h5oh      c3h6oh      o2c3h6oh    ch3chco
ch2ch2hco   o2c2h4hco   ho2c2h4co   ho2c2h4hco  oc2h4hco
ch3cocho    ch3coco     ch2cohco    hcoch2hco   hcoch2co
ch3coch2o2  ch3coch2o   ch3coch2o2h
propynal    c2hco

! Base C4

ic4h9       tc4h9       ic4h8       ic4h7
c4h4o       c3h4hco     c3h3hco     c3h3co
c4h10       pc4h9       sc4h9       c4h8        t2c4h8
c2c4h8      Ac4h7-1     Cc4h7-1     Dc4h7-1     c4h6
butyne      butyn2      meall       ic4h5
nc4h5       c4h4        nc4h3       ic4h3       c4h2
c4h9qjA     c4h9qjB
c4h8rAqA    c4h8rBqA    c4h8rCqA    c4h8rDqA
c4h8rAqB    c4h8rCqB    c4h8rDqB
c4h8qjAqA   c4h8qjBqA   c4h8qjCqA   c4h8qjDqA
c4h8qjAqB   c4h8qjCqB   c4h8qjDqB
c4h8o#3     c4h8o#4     c4h8o#5
c4h7oAqB    c4h7oAqC    c4h7oAqD    c4h7oBqA
c4h7oBqC    c4h7oBqD
nc4h9o2h    c4h7o2h     c4h7e1qB    c4h7oq
nc3h7hco    c3h7co      c3h7co3     c3h7co3h    c3h7co2
c4h7oh      ac3h5hco    ac3h5co     c2h3chcho
c4h8o2      butanone    mvk
ch2coc2h3   mhd         h2c4o       c4h
c4h6o2h     hoc4h6      ch3chch2hco
c3h6cho-1
ch3coc2h4p  ch3coc2h4o2 ch3coc2h4o2h ch3coc2h4o
c2h5cocH2   c2h5cocH2o2 c2h5cocH2o2h c2h5cocH2o
c4h7hco-1   c4h7co-1
c4h8hco-2   c4h7hco-2   c4h7co-2
```

```
! Base C5

nc5h12
Ac5h11      Bc5h11      Cc5h11
c5h10       c2c5h10     t2c5h10     Ac5h9-1
Bc5h9-1     Cc5h9-1     Dc5h9-1     Ec5h9-1     Dc5h9-2
c5h11qjA    c5h11qjB    c5h11qjC
c5h10rAqA   c5h10rBqA   c5h10rCqA   c5h10rDqA   c5h10rEqA
c5h10rAqB   c5h10rBqB   c5h10rCqB   c5h10rDqB   c5h10rEqB
c5h10rAqC   c5h10rBqC
c5h10qjAqA  c5h10qjBqA  c5h10qjCqA  c5h10qjDqA  c5h10qjEqA
c5h10qjAqB  c5h10qjBqB  c5h10qjCqB  c5h10qjDqB  c5h10qjEqB
c5h10qjAqC  c5h10qjBqC
c5h9oAqA    c5h9oAqB    c5h9oAqC    c5h9oAqD    c5h9oAqE
c5h9oBqA    c5h9oBqC    c5h9oBqD    c5h9oBqE    c5h9oCqA
c5h9oCqB
c5h10o#3    c5h10o#4    c5h10o#5    c5h10o#6
Ac5h9o#5    Dc5h9o#5
nc5h11o2h   c5h9o2h     c5h9e2qC
nc4h9hco    nc4h9co
c3h7coch3
nc3h7coch2  nc3h7coch2o2 nc3h7coch2o2h nc3h7coch2o
c3h6coch3-1  c3h6coch3-2  c3h6coch3-3
c2h5coc2h5
c2h5coc2h4p c2h5coc2h4o2 c2h5coc2h4o2h c2h5coc2h4o
c2h5coc2h4s
c2h5coc2h3  pc2h4coc2h3 sc2h4coc2h3  divinket
c5h9oh
c5h8-12     c5h8-13     c5h8-14     c5h7

ch3coc3h6o2-1 ch3coc3h6o2h-1 ch3coc3h6o-1
isoph       isope       isopy

! espèces en C6
!
c6h14
Ac6h13      Bc6h13      Cc6h13
c6h12-1     c6h12-2     c6h12-3
Cc6h11-1    Fc6h11-1    Ac6h11-3    Bc6h11-3
c6h10-13    c6h10-15    c6h9
c6h13qjA    c6h13qjB    c6h13qjC
c6h13qA     c6h13qB     c6h13qC
c6h13ojA    c6h13ojB    c6h13ojC
c6h12rBqA   c6h12rCqA   c6h12rDqA   c6h12rEqA
c6h12rAqB   c6h12rCqB   c6h12rDqB   c6h12rEqB   c6h12rFqB
c6h12rAqC   c6h12rBqC   c6h12rDqC   c6h12rEqC   c6h12rFqC
c6h12qjBqA  c6h12qjCqA  c6h12qjDqA  c6h12qjEqA
c6h12qjAqB  c6h12qjCqB  c6h12qjDqB  c6h12qjEqB  c6h12qjFqB
c6h12qjAqC  c6h12qjBqC  c6h12qjDqC  c6h12qjEqC  c6h12qjFqC
c6h11oAqB   c6h11oAqC   c6h11oAqD   c6h11oAqE
c6h11oBqA   c6h11oBqC   c6h11oBqD   c6h11oBqE   c6h11oBqF
c6h11oCqA   c6h11oCqB   c6h11oCqD   c6h11oCqE   c6h11oCqF
c6h12o-AB   c6h12o-BC   c6h12o-CD   c6h12o-AC   c6h12o-BD
c6h12o-AD   c6h12o-BE   c6h12o-AE
c5h11hco    c5h11co     hexanone

! Base C7

nc7h16
Ac7h15      Bc7h15      Cc7h15      Dc7h15
c7h14-1     c7h14-2     c7h14-3     c7h12-13    c7h12-16
Cc7h13-1    Dc7h13-1    Ac7h13-3
c7h15qjA    c7h15qjB    c7h15qjC    c7h15qjD
```

```
c7h14rBqA   c7h14rCqA   c7h14rDqA   c7h14rEqA
c7h14rAqB   c7h14rCqB   c7h14rDqB   c7h14rEqB   c7h14rFqB
c7h14rAqC   c7h14rBqC   c7h14rDqC   c7h14rEqC   c7h14rFqC
c7h14rGqC   c7h14rAqD   c7h14rBqD   c7h14rCqD
c7h14qjBqA  c7h14qjCqA  c7h14qjDqA  c7h14qjEqA
c7h14qjAqB  c7h14qjCqB  c7h14qjDqB  c7h14qjEqB  c7h14qjFqB
c7h14qjAqC  c7h14qjBqC  c7h14qjCqC  c7h14qjDqC  c7h14qjEqC
c7h14qjFqC  c7h14qjGqC  c7h14qjAqD  c7h14qjBqD  c7h14qjCqD
c7h14o-AB   c7h14o-BC   c7h14o-CD   c7h14o-AC   c7h14o-BD
c7h14o-CE   c7h14o-AD   c7h14o-BE   c7h14o-AE   c7h14o-BF
c7h15qA     c7h15qB     c7h15qC     c7h15qD
c7h15ojA    c7h15ojB    c7h15ojC    c7h15ojD
c7h13oAqB   c7h13oAqC   c7h13oAqD   c7h13oAqE
c7h13oBqA   c7h13oBqC   c7h13oBqD   c7h13oBqE   c7h13oBqF
c7h13oCqA   c7h13oCqB   c7h13oCqD   c7h13oCqE   c7h13oCqF
c7h13oCqG   c7h13oDqA   c7h13oDqB   c7h13oDqC
c6h13hco    c6h13co     heptanone
c6h11hco    c6h11co
P2c4h614    P2c4h513    P2c4h4134

! Base C8

nc8h18
Ac8h17      Bc8h17      Cc8h17      Dc8h17
c8h16-1     c8h16-2     c8h16-3     c8h16-4
c8h14       Cc8h15-1    Hc8h15-1
c8h17qjA    c8h17qjB    c8h17qjC    c8h17qjD
c8h16rBqA   c8h16rCqA   c8h16rDqA   c8h16rEqA
c8h16rAqB   c8h16rCqB   c8h16rDqB   c8h16rEqB   c8h16rFqB
c8h16rAqC   c8h16rBqC   c8h16rDqC   c8h16rEqC   c8h16rFqC
c8h16rGqC   c8h16rAqD   c8h16rBqD   c8h16rCqD   c8h16rEqD
c8h16rFqD   c8h16rGqD   c8h16rHqD
c8h16qjBqA  c8h16qjCqA  c8h16qjDqA  c8h16qjEqA
c8h16qjAqB  c8h16qjCqB  c8h16qjDqB  c8h16qjEqB  c8h16qjFqB
c8h16qjAqC  c8h16qjBqC  c8h16qjDqC  c8h16qjEqC  c8h16qjFqC
c8h16qjGqC  c8h16qjAqD  c8h16qjBqD  c8h16qjCqD  c8h16qjEqD
c8h16qjFqD  c8h16qjGqD  c8h16qjHqD
c8h16o#3    c8h16o#4    c8h16o#5    c8h16o#6
nc8h17o2h
c8h15oAqB   c8h15oAqC   c8h15oAqD   c8h15oAqE   c8h15oBqA
c8h15oBqC   c8h15oBqD   c8h15oBqE   c8h15oBqF   c8h15oCqA
c8h15oCqB   c8h15oCqD   c8h15oCqE   c8h15oCqF   c8h15oCqG
c8h15oDqA   c8h15oDqB   c8h15oDqC   c8h15oDqE   c8h15oDqF
c8h15oDqG   c8h15oDqH
c7h15hco    c7h15co     octanone


! Base C9

nc9h20
Ac9h19      Bc9h19      Cc9h19      Dc9h19      Ec9h19
c9h18-1     c9h18-2     c9h18-3     c9h18-4
Cc9h17-1    Dc9h17-2    Ec9h17-3    Fc9h17-4    c9h16
c9h19qjA    c9h19qjB    c9h19qjC    c9h19qjD    c9h19qjE
c9h18rBqA   c9h18rCqA   c9h18rDqA   c9h18rEqA   c9h18rAqB
c9h18rCqB   c9h18rDqB   c9h18rEqB   c9h18rFqB   c9h18rAqC
c9h18rBqC   c9h18rDqC   c9h18rEqC   c9h18rFqC   c9h18rGqC
c9h18rAqD   c9h18rBqD   c9h18rCqD   c9h18rEqD   c9h18rFqD
c9h18rGqD   c9h18rHqD   c9h18rAqE   c9h18rBqE   c9h18rCqE
c9h18rDqE
c9h18qjBqA c9h18qjCqA   c9h18qjDqA   c9h18qjEqA   c9h18qjAqB
c9h18qjCqB c9h18qjDqB   c9h18qjEqB   c9h18qjFqB   c9h18qjAqC
c9h18qjBqC c9h18qjDqC   c9h18qjEqC   c9h18qjFqC   c9h18qjGqC
c9h18qjAqD c9h18qjBqD   c9h18qjCqD   c9h18qjEqD   c9h18qjFqD
```

```
c9h18qjGqD    c9h18qjHqD    c9h18qjAqE    c9h18qjBqE    c9h18qjCqE
c9h18qjDqE
c9h17oAqB     c9h17oAqC     c9h17oAqD     c9h17oAqE     c9h17oBqA
c9h17oBqC     c9h17oBqD     c9h17oBqE     c9h17oBqF     c9h17oCqA
c9h17oCqB     c9h17oCqD     c9h17oCqE     c9h17oCqF     c9h17oCqG
c9h17oDqA     c9h17oDqB     c9h17oDqC     c9h17oDqE     c9h17oDqF
c9h17oDqG     c9h17oDqH     c9h17oEqA     c9h17oEqB     c9h17oEqC
c9h17oEqD
c9h18o-AB     c9h18o-BC     c9h18o-CD     c9h18o-DE     c9h18o-AC
c9h18o-BD     c9h18o-CE     c9h18o-DF     c9h18o-AD     c9h18o-BE
c9h18o-CF     c9h18o-AE     c9h18o-BF     c9h18o-CG
c9h19qA       c9h19qB       c9h19qC       c9h19qD       c9h19qE
c9h19ojA      c9h19ojB      c9h19ojC      c9h19ojD      c9h19ojE
c8h17hco      c8h17co       nonanone      c8h15hco      c8h15co


! mécanisme décane

nc10h22
Ac10h21       Bc10h21       Cc10h21       Dc10h21       Ec10h21
c10h20-1      c10h20-2      c10h20-3      c10h20-4      c10h20-5
Cc10h19-1     Dc10h19-2     Ec10h19-3     Fc10h19-4

c10h21qjA     c10h21qjB     c10h21qjC     c10h21qjD     c10h21qjE
c10h21qA      c10h21qB      c10h21qC      c10h21qD      c10h21qE
c10h21ojA     c10h21ojB     c10h21ojC     c10h21ojD     c10h21ojE

c10h20rBqA    c10h20rCqA    c10h20rDqA    c10h20rEqA
c10h20rAqB    c10h20rCqB    c10h20rDqB    c10h20rEqB    c10h20rFqB
c10h20rAqC    c10h20rBqC    c10h20rDqC    c10h20rEqC    c10h20rFqC
c10h20rGqC
c10h20rAqD    c10h20rBqD    c10h20rCqD    c10h20rEqD
c10h20rFqD    c10h20rGqD    c10h20rHqD
c10h20rAqE    c10h20rBqE    c10h20rCqE    c10h20rDqE
c10h20rFqE    c10h20rGqE    c10h20rHqE    c10h20rIqE

c10h20qjBqA   c10h20qjCqA   c10h20qjDqA   c10h20qjEqA
c10h20qjAqB   c10h20qjCqB   c10h20qjDqB   c10h20qjEqB
c10h20qjFqB
c10h20qjAqC   c10h20qjBqC   c10h20qjDqC   c10h20qjEqC
c10h20qjFqC   c10h20qjGqC
c10h20qjAqD   c10h20qjBqD   c10h20qjCqD   c10h20qjEqD
c10h20qjFqD   c10h20qjGqD   c10h20qjHqD
c10h20qjAqE   c10h20qjBqE   c10h20qjCqE   c10h20qjDqE
c10h20qjFqE   c10h20qjGqE   c10h20qjHqE   c10h20qjIqE

c10h19oAqB    c10h19oAqC    c10h19oAqD    c10h19oAqE
c10h19oBqA    c10h19oBqC    c10h19oBqD    c10h19oBqE    c10h19oBqF
c10h19oCqA    c10h19oCqB    c10h19oCqD    c10h19oCqE    c10h19oCqF
c10h19oCqG
c10h19oDqA    c10h19oDqB    c10h19oDqC    c10h19oDqE    c10h19oDqF
c10h19oDqG    c10h19oDqH
c10h19oEqA    c10h19oEqB    c10h19oEqC    c10h19oEqD    c10h19oEqF
c10h19oEqG    c10h19oEqH    c10h19oEqI

c10h20o-AB    c10h20o-BC    c10h20o-CD    c10h20o-DE    c10h20o-EF
c10h20o-AC    c10h20o-BD    c10h20o-CE    c10h20o-DF
c10h20o-AD    c10h20o-BE    c10h20o-CF    c10h20o-DG
c10h20o-AE    c10h20o-BF    c10h20o-CG

Fc10h19oB     Gc10h19oC

c9h19hco      c9h19co
```

```
c10h20rohAB   c10h20qjohAB   c10h20rohBC    c10h20qjohBC
c10h20rohCD   c10h20qjohCD   c10h20rohDE    c10h20qjohDE
c10h20rohEF   c10h20qjohEF

c9h19hco      c9h19co



choch2ch2cho  choch2ch2co
nc4h9coch2    nc4h9coch2o2   nc4h9coch2o2h  nc4h9coch2o
nc5h11coch2   nc5h11coch2o2  nc5h11coch2o2h nc5h11coch2o
nc6h13coch2   nc6h13coch2o2  nc6h13coch2o2h nc6h13coch2o
nc7h15coch2   nc7h15coch2o2  nc7h15coch2o2h nc7h15coch2o

nc3h7coc2h4p  nc3h7coc2h4o2  nc3h7coc2h4o2h nc3h7coc2h4o
nc4h9coc2h4p  nc4h9coc2h4o2  nc4h9coc2h4o2h nc4h9coc2h4o
nc5h11coc2h4p nc5h11coc2h4o2 nc5h11coc2h4o2h nc5h11coc2h4o
nc6h13coc2h4p nc6h13coc2h4o2 nc6h13coc2h4o2h nc6h13coc2h4o

nc5h11coc3h6-1   nc5h11coc3h6o2-1  npecoc3h6o2h-1    nc5h11coc3h6o-1
nc4h9coc3h6-1    nc4h9coc3h6o2-1   nc4h9coc3h6o2h-1  nc4h9coc3h6o-1
nc3h7coc3h6-1    nc3h7coc3h6o2-1   nc3h7coc3h6o2h-1  nc3h7coc3h6o-1
c2h5coc3h6-1     c2h5coc3h6o2-1    c2h5coc3h6o2h-1   c2h5coc3h6o-1

ch3coc5h9-1    ch2coc5h9-1    ch3coc5h8-13   ch3coc5h8-15
c2h5coc5h9-1   sc2h4coc5h9-1  c2h5coc5h8-13  c2h5coc5h8-15

c2h3coc3h7     c2h3coc3h6-3   c2h3coc3h6-2
c2h3coc4h9     c2h3coc4h8-4   c2h3coc4h8-3
c2h3coc5h11    c2h3coc5h10-5  c2h3coc5h10-4
c2h3coc6h13    c2h3coc6h12-6  c2h3coc6h12-5



! Naphtenes : Cyclohexane and derivates

cyc6h12        cyc6h11        cyc6h10        cyc6h9
chxone         Bchxone        Cchxone        Dchxone
chxe2oA        chxe3oA        Dchxe2oA

chxqjA         chxqArC        chxo-AC        chxqAqjC        chxoAqC
chxqAqCrE      chxoAojC       Fc6oAoC        Fc6oAoE         c6e5oAqC
c6e5oAojC

Fc6e1oC        c6e5oA         c6e5oyA        Ac6e5oC         Ac6e5oB

chxoqjB        DchxoqB        chxoqBqjD      chxoAoBqD       chxoAoBojD
c6e5oAoB       c6e5oyAoB      Fc6oAoDoE      Fc6oAoCoD

Ac6e3e5oB      chxoAoD        BchxoAoD       chxe2oAoD       c6e1oCoyF
Echxe2oAoD     c6e2e5oyAoD

ch2coch2hco

! Naphtenes : C7


Ec5oA
Gc7h13-1       Dc7h13-1
c7e6oyA        Gc7e1oC        Ec5e1oC        Ac7e6oB         Gc7e1oD
Ac5e4oB        Gc7e1oF

c6h7C           Lc6h7          Lc6h6          Lc6h4           U-c6h5
```

```
chxe1rD         chD13          chD14
cyc6h9o        chxe1qjC       Echxe1qC       chxe1qCqjE     chxe1oCqE
chxe1oCojE
Fc6e3oAoE      Dc6e5oAoC      Fc6e5oA        Fc6e2oA        Fc6h9-13
hex135         ac3h4hco1      sc3h5co        Ac6h9-15

CPD            c5h5           c5h4oh         c5h5o         c5h4o
cyc5h7         cyc5h8

! Aromatics: Benzene and derivates
hex1245        c6h615         mc6h6          FULVENE        che24one
c6h6           c6h5           c6h5o          c6h5oh         c6h4o2
c6h5o2         c6h5o2h        c6h3o2         c6h3o3         c5h4
c5h3

! Aromatics: toluene and derivates

toluen         phch2          phch2oh        phch2o
phhco          phco           hoc6h4ch3      oc6h4ch3
phch2o2

! Aromatics: C8

phc2h5         Aphc2h4        Bphc2h4        styren         ASTYRYL
BSTYRYL        phc2h          c6h4c2h3
phch2hco       phch2co        phcoch2
c6h5cco        phchco

c14h14         napht          biphenyl
c10h9          c10h10         U-c6h5         c6h4c2h        A1c2hAC
A2-X           A2O            A2oh           A1c2h3AC       indenyl

c10h7ch3       c10h7ch2       c10h7hco       c10h7co        c10h7ch2oh
c10h7c2h5      c10h7chch3     c10h7c2h3      A2R5           indene
indenoxy       phnthrn
c10h7ch2o2h    c10h7ch2o2     c10h7cho2h     c10h7ch2o
ch3c6h4c2h3

hocho ocho hoch2o
c10h18-13 c9h16-13 c8h14-13

c2h5coc6h12-4 non3*o6oo non3*o4j6ooh non3*o4oo6ooh non3*o6*o4ooh
c3h7coc5h10-3 non4*o7oo non4*o5j7ooh non4*o5oo7ooh non4*o7*o5ooh

ch3coc8h16-6 dec2*o5oo dec2*o3j5ooh dec2*o3oo5ooh dec2*o5*o3ooh
c2h5coc7h14-5 dec3*o6oo dec3*o4j6ooh dec3*o4oo6ooh dec3*o6*o4ooh
c3h7coc6h12-4 dec4*o7oo dec4*o5j7ooh dec4*o5oo7ooh dec4*o7*o5ooh
c4h9coc5h10-3 dec5*o8oo dec5*o6j8ooh dec5*o6oo8ooh dec5*o8*o6ooh
c5h11coc4h8-2 dec5*o2oo dec5*o4j2ooh dec5*o4oo2ooh dec2*o5*o4ooh

c10ald3oxo c9ald3oxo c8ald3oxo c7ald3oxo c6ald3oxo c5ald3oxo
c4ald3oxo
mecomeco etcomeco prcomeco bucomeco c5h11coch2co c6h13coch2co
c7h15coch2co


!Mécamisme MeOctanoate

mp2d
mb          mb2d        mb3d
mpe         mpe4d       mpe3d       mpe2d
mhx         mhx5d       mhx4d       mhx3d       mhx2d
mhp         mhp6d       mhp5d       mhp4d       mhp3d       mhp2d
mo          mo7d        mo6d        mo5d        mo4d        mo3d
```

```
mo2d
mo8*o       mhp7*o      mhx6*o      mpe5*o      mb4*o       mp3*o       me2
*o
!!!!!
mp2d3j      mp2d2j      mp2dmj
!!!!!!
c5ald4oxo   c4ald2oxo   c5ald2oxo   baoj2d      c2h5coco    c5h7o2
cjhchchco   mb4j        mb4j3*o     c4h9coco    c5h10co
c2h3co2     me2oo       me2ooh      me2o
mb2j        mb2o        mb2oh3j     mb2oh3oo
mb2oo       mb2ooh      mb2ooh3*o   mb2ooh3j    mb2ooh3oo   mb2ooh4*o
mb2ooh4j    mb2ooh4oo   mb2oohm*o   mb2oohmj    mb2oohmoo
mb3j        mb3o        mb3oh4j     mb3oh4oo    mb3oo       mb3ooh
mb3ooh2*o   mb3ooh2oo   mb3ooh4*o   mb3ooh4j    mb3ooh4oo   mb4*o2*o
mb4j*o      mb4o        mb4oo       mb4ooh      mb4ooh2*o   mb4ooh2d
mb4ooh2j    mb4ooh2oo   mb4ooh3*o   mb4ooh3j    mb4ooh3oo   mbcy2om
mbcy3o2     mbcy4o2     mbcy4o3     mbm*o       mbmj        mbmj*o
mbmo        mbmoo       mbmooh      mbmooh2*o   mbmooh2d    mbmooh2j
mbmooh2oo   me2*om*o    me2*omj*o   me2j        me2j*o
mp2oh3j     mp2oh3oo    mp3*o2*o    mb4oo2*o    mb4o2*o
mp3j        mp3j*o      mp3j*o2*o   mp3j2*o     sc3h5och2
sc3h5och2   ch2chchco   chooco
mp3ooh2*o   mp3oo2*o    mp3o2*o     sc2h4oh     me2j*om*o
sc2h4oh     c5h8co      c4h6co
mb4j2*o     c2h3o1,2    c2h4o1,2    cocho       prooh1-2
acetoo2     acetoo2h    acetoo      c5h8        c5h9
c3h6o1-2    mb3ooh2j    mb4j*o2*o   ic3h5cho    tc3h6ocho   tc3h6cho
ic3h7cho    ic3h6co     ic3h5co     ic3h7co     tc3h6o2cho  tc3h6o2hco
ipro2hcho   tc3h6ohcho  tc3h6oh     ic3h5oh     ch2cch2oh   c6h12cho-1
c6h12cho-2  c6h12cho-3  c6h12cho-4  c4h8cho-1   ch3chcoch3  c2h3coch3
c7h15qjA
c2h5cochh3  c6h12cho-5  c4j3ooh2*o  c43oo2*o    c6h12cho-6
ch2ch2cho   c3h6cho-3   c3h6cho-2   c2h5chco    ic3h5coch3  ic3h5coch2
ac3h4coch3  sc3h5coch2  ch3chocho   ch3chcho    sc3h5cho    ic3h6cho
iprchcoch3  prcoco      aprchcoch3  iprchcoch2  ic3h7coch3  ic3h7coch2
ic3h6coch3  tc3h6coch3  nprcoet     prcoet-1    prcoet-2    prcoet-3
nprcoets    iprcoet
iprdcoet    tprdcoet    iprcoetp    iprcoets    iprcoc2h3   iprdcoc2h3
tprdcoc2h3  ic3h5coet   ac3h4coet   ic3h5coetp  ic3h5coets  ac3h5cho
hocho
bucomeco    prcoetco    prcomeco    etcoetco    etcomeco    mecoetco
mecomeco    c4h8cho-3   c4h8cho-4   mp3oo       mp3ooh      mp3o
o2c2h4cho   ho2c2h4cho  oc2h4cho    c6h10co     c4h7o       choc3h6co
choc3h6cho  ho2prcoch3
oprcoch3    mb4oo3*o    mb4o3*o
mp2dmoo     mp2dmooh    mp2dmo      pc4h9o2h    pc4h9o
!!!!!
c6ald5oxo   c4h9cocho   c6h12co     c3h7coco
c5h11cocho  c6ald4oxo   choc2h4cho   baoj2*o
c4h8co      c6h13coco   c7h14co     c7ald4oxo   c7h12  c7h12co
io2c4h8ooh  iioohc4h8o  c5h2        c5h3        c7h15co   h2cccch2
ch3ccch     c4h7        ch3chcch    c7h13       mbmj3*o   mpmj
c4h9po2     ic4h8ooh    pent1o
jc4h8ooh    jo2c4h8ooh  joohc4h8o   kc4h8ooh    ko2c4h8ooh  koohc4h8o
c7h13a      c7h13b
c6h1114     c6h1115 c6h1112
mhx6o5*o    oc4h6 c4h5o  c5h11coco  choc2h4co  mhx6oo4*o   mhx6o4*o
mhx6oo5*o
choch2cho choch2co    mhx6oo3*o   mhx6o3*o
c6h1012  c5h915    ch3ch2o    hoc2h4o2
acetoch2o c6h12rAqE   c6h12qjAqE
!!!!!!Methyl pentenoata !!!!!!!!!
mpe5j       mpe4j       mpe3j       mpe2j       mpemj       mpe5oo
mpe4oo
```

```
mpe3oo     mpe2oo     mpemoo     mpe5ooh4j  mpe5ooh3j  mpe5ooh2j
mpe4ooh5j
mpe4ooh3j  mpe4ooh2j  mpe3ooh5j  mpe3ooh4j  mpe3ooh2j  mpe2ooh5j
mpe2ooh4j
mpe2ooh3j  mpe2oohmj  mpemooh2j  mpe5ooh4oo mpe5ooh3oo mpe5ooh2oo
mpe4ooh5oo
mpe4ooh3oo mpe4ooh2oo mpe3ooh5oo mpe3ooh4oo mpe3ooh2oo mpe2ooh5oo
mpe2ooh4oo
mpe2ooh3oo mpe2oohmoo mpemooh2oo mpe4ooh5*o mpe3ooh5*o mpe2ooh5*o
mpe5ooh4*o
mpe3ooh4*o mpe2ooh4*o mpe5ooh3*o mpe4ooh3*o mpe2ooh3*o mpe5ooh2*o
mpe4ooh2*o
mpe3ooh2*o mpemooh2*o mpe2oohm*o mpecy5o3   mpecy5o2   mpecy4o2
mpecy2om
mpe5ooh    mpe4ooh    mpe3ooh    mpe2ooh    mpemooh    mpe5o
mpe4o
mpe3o      mpe2o      mpemo      mpe4oh5j   mpe3oh4j   mpe2oh3j
mpe4oh5oo
mpe3oh4oo  mpe2oh3oo  mpe4d3j    mpe4d2j    mpe3d2j    peaoj
peaoj2*o
mpe5*o2*o  mpe5*o3*o  mpe5j*o3*o mpe5*o4*o  mpe5j*o4*o mpem*o
mpe5j*o    mpe5j4*o   mpe5j3*o   mpe5j2*o   mpe4d2d    mpe5oo4*o
mpe5o4*o
mpe5oo3*o  mpe5o3*o
!!!!!methyl hexenoate!!!!!!!!!!!
mhx6j      mhx5j      mhx4j      mhx3j      mhx2j      mhxmj
mhx6oo
mhx5oo     mhx4oo     mhx3oo     mhx2oo     mhxmoo     mhx6ooh5j
mhx6ooh4j
mhx6ooh3j  mhx6ooh2j  mhx5ooh6j  mhx5ooh4j  mhx5ooh3j  mhx5ooh2j
mhx4ooh6j
mhx4ooh5j  mhx4ooh3j  mhx4ooh2j  mhx3ooh6j  mhx3ooh5j  mhx3ooh4j
mhx3ooh2j
mhx2ooh6j  mhx2ooh5j  mhx2ooh4j  mhx2ooh3j  mhx2oohmj  mhxmooh2j
mhx6ooh5oo
mhx6ooh4oo mhx6ooh3oo mhx6ooh2oo mhx5ooh6oo mhx5ooh4oo mhx5ooh3oo
mhx5ooh2oo
mhx4ooh6oo mhx4ooh5oo mhx4ooh3oo mhx4ooh2oo mhx3ooh6oo mhx3ooh5oo
mhx3ooh4oo
mhx3ooh2oo mhx2ooh6oo mhx2ooh5oo mhx2ooh4oo mhx2ooh3oo mhx2oohmoo
mhxmooh2oo
mhx5ooh6*o mhx4ooh6*o mhx3ooh6*o mhx2ooh6*o mhx6ooh5*o mhx4ooh5*o
mhx3ooh5*o
mhx2ooh5*o mhx6ooh4*o mhx5ooh4*o mhx3ooh4*o mhx2ooh4*o mhx6ooh3*o
mhx5ooh3*o
mhx4ooh3*o mhx2ooh3*o mhx6ooh2*o mhx5ooh2*o mhx4ooh2*o mhx3ooh2*o
mhxmooh2*o
mhx2oohm*o mhxcy6o4   mhxcy6o3   mhxcy6o2   mhxcy5o3   mhxcy5o2
mhxcy4o2
mhxcy3o2   mhxcy2om   mhx6ooh    mhx5ooh    mhx4ooh    mhx3ooh
mhx2ooh
mhxmooh    mhx6o      mhx5o      mhx4o      mhx3o      mhx2o
mhxmo
mhx5oh6j   mhx4oh5j   mhx3oh4j   mhx2oh3j   mhx5oh6oo  mhx4oh5oo
mhx3oh4oo
mhx2oh3oo  mhx6j*o    mhx6j5*o   mhx6j4*o   mhx6j3*o   mhxm*o
mhxmj*o
mhx6*o4*o  mhx6j*o4*o mhx6*o3*o  hxaoj      hxaoj2*o
mhx5d4j    mhx5d2j    mhx4d3j    mhx4d2j    mhx3d2j    mhx5d3d
!!!!! methyl heptanoate!!!!!
mhp7j      mhp6j      mhp5j      mhp4j      mhp3j      mhp2j
mhpmj
mhp7oo     mhp6oo     mhp5oo     mhp4oo     mhp3oo     mhp2oo
mhpmoo
```

```
mhp7ooh6j  mhp7ooh5j  mhp7ooh4j  mhp7ooh3j  mhp6ooh7j  mhp6ooh5j
mhp6ooh4j
mhp6ooh3j  mhp6ooh2j  mhp5ooh7j  mhp5ooh6j  mhp5ooh4j  mhp5ooh3j
mhp5ooh2j
mhp4ooh7j  mhp4ooh6j  mhp4ooh5j  mhp4ooh3j  mhp4ooh2j  mhp3ooh7j
mhp3ooh6j
mhp3ooh5j  mhp3ooh4j  mhp3ooh2j  mhp2ooh6j  mhp2ooh5j  mhp2ooh4j
mhp2ooh3j
mhp2oohmj  mhpmooh2j  mhp7ooh6oo mhp7ooh5oo mhp7ooh4oo mhp7ooh3oo
mhp6ooh7oo
mhp6ooh5oo mhp6ooh4oo mhp6ooh3oo mhp6ooh2oo mhp5ooh7oo mhp5ooh6oo
mhp5ooh4oo
mhp5ooh3oo mhp5ooh2oo mhp4ooh7oo mhp4ooh6oo mhp4ooh5oo mhp4ooh3oo
mhp4ooh2oo
mhp3ooh7oo mhp3ooh6oo mhp3ooh5oo mhp3ooh4oo mhp3ooh2oo mhp2ooh6oo
mhp2ooh5oo
mhp2ooh4oo mhp2ooh3oo mhp2oohmoo mhpmooh2oo mhp6ooh7*o mhp5ooh7*o
mhp4ooh7*o
mhp3ooh7*o mhp7ooh6*o mhp5ooh6*o mhp4ooh6*o mhp3ooh6*o mhp2ooh6*o
mhp7ooh5*o
mhp6ooh5*o mhp4ooh5*o mhp3ooh5*o mhp2ooh5*o mhp7ooh4*o mhp6ooh4*o
mhp5ooh4*o
mhp3ooh4*o mhp2ooh4*o mhp7ooh3*o mhp6ooh3*o mhp5ooh3*o mhp4ooh3*o
mhp2ooh3*o
mhp6ooh2*o mhp5ooh2*o mhp4ooh2*o mhp3ooh2*o mhpmooh2*o mhp2oohm*o
mhpcy7o5
mhpcy7o4   mhpcy7o3   mhpcy6o4   mhpcy6o3   mhpcy6o2   mhpcy5o3
mhpcy5o2
mhpcy4o2   mhpcy3o2   mhpcy2om   mhp7ooh    mhp6ooh    mhp5ooh
mhp4ooh
mhp3ooh    mhp2ooh    mhpmooh    mhp7o      mhp6o      mhp5o
mhp4o
mhp3o      mhp2o      mhpmo      mhp6oh7j   mhp5oh6j   mhp4oh5j
mhp3oh4j
mhp2oh3j   mhp6oh7oo  mhp5oh6oo  mhp4oh5oo  mhp3oh4oo  mhp2oh3oo
mhp7j*o    mhp7j6*o   mhp7j5*o   mhp7j4*o
mhpm*o     mhpmj*o    mhp7*o5*o  mhp7j*o5*o mhp6d4d    hpaoj
hpaoj2*o
mhp6d5j    mhp6d2j    mhp5d4j    mhp5d2j    mhp4d3j    mhp4d2j
mhp3d2j
!!!!!methyl octanoate!!!!!
mo8j       mo7j       mo6j       mo5j       mo4j       mo3j
mo2j
momj       mo8oo      mo7oo      mo6oo      mo5oo      mo4oo
mo3oo
mo2oo      momoo      mo8ooh7j   mo8ooh6j   mo8ooh5j   mo8ooh4j
mo7ooh8j
mo7ooh6j   mo7ooh5j   mo7ooh4j   mo7ooh3j   mo6ooh8j   mo6ooh7j
mo6ooh5j
mo6ooh4j   mo6ooh3j   mo6ooh2j   mo5ooh8j   mo5ooh7j   mo5ooh6j
mo5ooh4j
mo5ooh3j   mo5ooh2j   mo4ooh8j   mo4ooh7j   mo4ooh6j   mo4ooh5j
mo4ooh3j
mo4ooh2j   mo3ooh7j   mo3ooh6j   mo3ooh5j   mo3ooh4j   mo3ooh2j
mo2ooh6j
mo2ooh5j   mo2ooh4j   mo2ooh3j   mo2oohmj   momooh2j   mo8ooh7oo
mo8ooh6oo
mo8ooh5oo  mo8ooh4oo  mo7ooh8oo  mo7ooh6oo  mo7ooh5oo  mo7ooh4oo
mo7ooh3oo
mo6ooh8oo  mo6ooh7oo  mo6ooh5oo  mo6ooh4oo  mo6ooh3oo  mo6ooh2oo
mo5ooh8oo
mo5ooh7oo  mo5ooh6oo  mo5ooh4oo  mo5ooh3oo  mo5ooh2oo  mo4ooh8oo
mo4ooh7oo
mo4ooh6oo  mo4ooh5oo  mo4ooh3oo  mo4ooh2oo  mo3ooh7oo  mo3ooh6oo
```

```
mo3ooh5oo
mo3ooh4oo  mo3ooh2oo  mo2ooh6oo  mo2ooh5oo  mo2ooh4oo  mo2ooh3oo
mo2oohmoo
momooh2oo  mo7ooh8*o  mo6ooh8*o  mo5ooh8*o  mo4ooh8*o  mo8ooh7*o
mo6ooh7*o
mo5ooh7*o  mo4ooh7*o  mo3ooh7*o  mo8ooh6*o  mo7ooh6*o  mo5ooh6*o
mo4ooh6*o
mo3ooh6*o  mo2ooh6*o  mo8ooh5*o  mo7ooh5*o  mo6ooh5*o  mo4ooh5*o
mo3ooh5*o
mo2ooh5*o  mo8ooh4*o  mo7ooh4*o  mo6ooh4*o  mo5ooh4*o  mo3ooh4*o
mo2ooh4*o
mo7ooh3*o  mo6ooh3*o  mo5ooh3*o  mo4ooh3*o  mo2ooh3*o  mo6ooh2*o
mo5ooh2*o
mo4ooh2*o  mo3ooh2*o  momooh2*o  mo2oohm*o  mocy8o6    mocy8o5
mocy8o4
mocy7o5    mocy7o4    mocy7o3    mocy6o4    mocy6o3    mocy6o2
mocy5o3
mocy5o2    mocy4o2    mocy2om    mo8ooh     mo7ooh     mo6ooh
mo5ooh
mo4ooh     mo3ooh     mo2ooh     momooh     mo8o       mo7o
mo6o
mo5o       mo4o       mo3o       mo2o       momo
mo7oh8j    mo6oh7j
mo5oh6j    mo4oh5j    mo3oh4j    mo2oh3j    mo7oh8oo   mo6oh7oo
mo5oh6oo   mo4oh5oo   mo3oh4oo   mo2oh3oo
mo8j*o
mom*o      momj*o
mo7d6j     mo7d2j     mo6d5j     mo6d2j     mo5d4j     mo5d2j
mo4d3j
mo4d2j     mo3d2j     oaoj       oaoj2*o
!stanford
phch3ch2
phch3hco
c6h4ch3
phch3ch3
c8h9o2
c8h8ooh
oc8h7ooh
c9h6o
memj
memoo
ch3ocooo
c9h19cooo
END

END



REACTIONS

!////////////////////////////////////Bloc pression 10
atm/////////////////////////////////////////////////

c2h3+o2=ch2hco+o                        1.176E+17   -1.36    5580.0 !
10 atm divided by 3 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-
4441
c2h3+o2=ch2o+hco                        9.275E+25   -3.96    7043.0 !
10 atm times 2.5 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=chocho+h                        7.780E+20   -2.94    5541.0 !
10 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=c2h2+ho2                        3.250E+19   -2.26    7932.0 !
10 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
```

```
ch3+oh=ch2oh+h                          1.990E+19   -1.68   11157.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=ch3o+h                           9.950E+14   -0.82   16872.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=sch2+h2o                         6.370E+18   -1.67   11141.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=ch2o+h2                          7.390E+14   -1.13   14551.0 !
(DEAN,10BAR 87)

c2h5+o2=c2h4+ho2                        1.010E+31   -5.81   15860.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
c2h5+o2=c2h4o2h                         2.370E+42   -9.65   16150.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
c2h5+o2=ch3hco+oh                       6.930E+17   -2.171  14020.0 !
(90BoZ/D,10Bar)

c3h3+c3h3=c6h5+h                        3.671E+26   -3.879  28960.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=c6h6                          3.888E+50  -11.01   20320.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=FULVENE                       1.071E+61  -13.96   28084.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       3.204E+28   -5.043   4517.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       5.620E+60  -13.93   27093.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       7.975E+29   -5.50    4665.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate

FULVENE=c6h6                            2.951E+31   -4.97   88465.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
FULVENE=c6h5+h                          8.511E+24   -2.505 113330.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799

nc4h5+c2h2=c6h6+h                       1.690E+16   -1.03    8968.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
nc4h5+c2h2=FULVENE+h                    1.740E+19   -1.86   12384.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=c6h6+h                       8.250E+24   -3.76   26565.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=FULVENE+h                    9.738E+26   -3.76   21329.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747



!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€                BASE C0-C4
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!*******************************************************************
```

```
************************
!****************************************** BASE C0
****************************************
!*********************************************************************
************************

!************
! h reactions
!************

h+h+m=h2+m                      1.000E+18     -1.0         0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
h+o2=oh+o                       1.900E+14      0.0     16812.0

h+o2+m=ho2+m                    8.000E+17     -0.80         0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.40/

h+oh+m=h2o+m                    3.000E+22     -2.0         0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/


!*************
! h2 reactions
!*************

h2+o2=oh+oh                     1.700E+13      0.0     47780.0 !
(MiLLER 77)
o+h2=oh+h                       1.30E+04       2.80     5922.0
h2+oh=h2o+h                     2.160E+08      1.5      3430.0

!************
! o reactions
!************

o+o+m=o2+m                      1.140E+17     -1.0         0.0 !
(BAULch 76)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
o+h+m=oh+m                      6.200E+16     -0.6         0.0 !
(DiXon-LEWiS 81)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/


!*************
! oh reactions
!*************

h2o+o=oh+oh                     1.500E+10      1.14      17260.0 !
(WarnATZ 84)

oh+oh(+m)=h2o2(+m)              7.220E+13     -0.37         0.0
    LOW /2.211E+19 -0.76 0.0/
    TROE /0.5 1E+08 1E-06/

!***************
! h2o reactions
!***************
```

```
!***************
! ho2 reactions
!***************

ho2+oh=h2o+o2                   1.450E+13      0.0      -497.0 !
(KEYSER 88)
ho2+o=oh+o2                     2.440E+13      0.0      -446.0
h+ho2=h2+o2                     2.140E+13      0.0      1411.0 !
(94BAU/coB) divided by 2
h+ho2=oh+oh                     8.400E+13      0.0       875.0 !
(94BAU/coB) divided by 2
h+ho2=h2o+o                     3.010E+13      0.0      1721.0 !
(BAULch 92)
ho2+ho2=h2o2+o2                 4.200E+14      0.0     11982.0 !
(hiPPLER  90)
    DUPLICATE
ho2+ho2=h2o2+o2                 1.300E+11      0.0     -1630.0 !
(hiPPLER  90)
    DUPLICATE


!****************
! h2o2 reactions
!****************

h2o2+oh=ho2+h2o                 5.800E+14      0.0      9557.0
h2o2+h=ho2+h2                   1.700E+12      0.0      3750.0
h2o2+h=h2o+oh                   1.000E+13      0.0      3590.0
h2o2+o=ho2+oh                   2.800E+13      0.0      6400.0


!*********************************************************************
************************
!****************************************** BASE C1
****************************************
!*********************************************************************
************************


!*************
! CO reactions
!*************
co+ho2=co2+oh                   1.150E+05      2.30    17550.0
co+oh=co2+h                     9.42E+03     2.25  -2351.0 !Marinov
4.400E+06      1.50     -740.0
co+o+m=co2+m                    2.830E+13      0.0     -4540.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
co+o2=co2+o                     2.530E+12      0.0     47700.0

!***************
! hco reactions
!***************

hco+m=h+co+m                    2.300E+17     -1.0     17090.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
hco+oh=co+h2o                   1.000E+14      0.0         0.0
hco+o=co+oh                     3.000E+13      0.0         0.0
hco+o=co2+h                     3.000E+13      0.0         0.0
hco+h=co+h2                     7.220E+13      0.0         0.0
hco+o2=co+ho2                   7.580E+12      0.0       410.0
hco+ch3=co+ch4                  1.200E+14      0.0         0.0
hco+ho2=co2+oh+h                3.000E+13      0.0         0.0
```

```
hco+hco=ch2o+co                 1.200E+13      0.0         0.0
hco+hco=h2+co+co                3.000E+12      0.0         0.0
hco+c2h6=ch2o+c2h5              4.700E+04      2.7     18235.0

!***************
! o2cho, ho2cho and ocho reactions
!***************

o2cho=hco+o2                          7.766E+26   -3.96   44230.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
                                rev /  1.200E+11    0.00   -1100.0 /
ho2cho=ocho+oh                        5.010E+14    0.00   40150.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
                                rev /  2.322E+06    2.15     655.0 /
ocho+m=h+co2+m                        2.443E+15   -0.50   26500.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
                                rev /  7.500E+13    0.00   29000.0 /
!hoch2o=ch2o+oh                         8.545E+13   -0.10 1.753E+04
!                                 rev / 2.600E+12    0.00 -6.140E+02
/
hoch2o=hocho+h                        1.000E+14    0.00 1.490E+04
                                 rev / 5.917E+11    0.64 1.230E+04 /
hocho+m=co+h2o+m                      2.300E+13    0.00 5.000E+04
                                 rev / 1.422E+10    0.46 4.684E+04 /
hocho+m=co2+h2+m                      1.500E+16    0.00 5.700E+04
                                 rev / 2.399E+14    0.46 6.102E+04 /
hocho=hco+oh                          4.593E+18   -0.46 1.083E+05
                                 rev / 1.000E+14    0.00 0.000E+00 /
ch2o+ocho=hco+hocho                   5.600E+12    0.00 1.360E+04
                                 rev / 8.584E+11    0.04 2.675E+04 /
ocho+ho2=hocho+o2                     3.500E+10    0.00 -3.275E+03
                                 rev / 3.699E+12   -0.29 5.269E+04 /
ocho+h2o2=hocho+ho2                   2.400E+12    0.00 1.000E+04
                                 rev / 1.793E+11    0.36 2.479E+04 /
hocho+oh=h2o+co2+h                    2.620E+06    2.06 9.160E+02
                                 rev / 0.000E+00    0.00 0.000E+00 /
hocho+oh=h2o+co+oh                    1.850E+07    1.51 -9.620E+02
                                 rev / 0.000E+00    0.00 0.000E+00 /
hocho+h=h2+co2+h                      4.240E+06    2.10 4.868E+03
                                 rev / 0.000E+00    0.00 0.000E+00 /
hocho+h=h2+co+oh                      6.030E+13   -0.35 2.988E+03
                                 rev / 0.000E+00    0.00 0.000E+00 /
hocho+ch3=ch4+co+oh                   3.900E-07    5.80 2.200E+03
                                 rev / 0.000E+00    0.00 0.000E+00 /
hocho+ho2=h2o2+co+oh                  1.000E+12    0.00 1.192E+04
                                 rev / 0.000E+00    0.00 0.000E+00 /
hocho+o=co+oh+oh                      1.770E+18   -1.90 2.975E+03
                                 rev / 0.000E+00    0.00 0.000E+00 /
!***************
! ch4 reactions
!***************

!ch4+o2=ch3+ho2                 4.000E+13      0.0     56900.0
ch3+ho2=ch4+o2                  1.000E+12      0.0         0.0 !
LECONG
ch4(+m)=ch3+h(+m)               2.400E+16      0.0    104913.0
    LOW /4.5E+17 0.0 90800/
    TROE /0.64 1.0E-15 3195.0 12126.0/
ch4+oh=ch3+h2o                  1.600E+06      2.10     2462.0 !
Warnatz 84
ch4+o=ch3+oh                    1.620E+06      2.30     7094.0
ch4+h=ch3+h2                    2.250E+04      3.0      8756.6
ch4+ch2=ch3+ch3                 4.300E+12      0.0     10038.0
```

```
!***************
! ch3 reactions
!***************

ch3+m=ch2+h+m                   1.900E+16      0.00    91600.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch3+m=ch+h2+m                   6.900E+14      0.0     82460.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
!ch3+ho2=ch3o+oh                 5.000E+12      0.0         0.0 ! Troe
ch3+ho2=ch3o+oh                 5.000E+11      0.269    -687.6 !
Jasper et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 279-286 /2
ch3+h2o2=ch4+ho2                6.100E+09      0.0      -596.0 !
ch3+o=h+ch2o                    8.430E+13      0.0         0.0
ch3+o=>h+h2+co                  3.370E+13      0.0         0.0
ch3+o2=ch2o+oh                  6.620E+11      0.00    14188.0 !
ch3+o2=ch3o+o                   6.600E+13      0.0     31398.0
ch3+ch3=c2h5+h                  3.010E+13      0.0     13513.0
ch3+ch3(+m)=c2h6(+m)            9.210E+16     -1.174     635.8
    LOW /1.135E+36 -5.246 1705/
    TROE /0.405 1120.0 69.6 1.00E+15/
ch3+ch3o=ch4+ch2o               2.409E+13      0.0         0.0
ch3+ch2oh=ch4+ch2o              2.410E+12      0.0         0.0
ch3+o2(+m)=ch3o2(+m)            7.800E+08      1.2         0.0
    LOW/5.8E+25 -3.30 0.0/
    TROE /0.664 100000.0 10/
ch3+h=ch2+h                   7.000E+13      0.0     15100.0

ch3+oh=ch2+h2o                3.000E+06      2.0      2500.0 ! LECONG

!***************
! ch2 reactions
!***************

ch2+oh=ch+h2o                   1.130E+07      2.0      3000.0
ch2+oh=ch2o+h                   2.500E+13      0.0         0.0
ch2+o=co+h+h                    5.000E+13      0.0         0.0
ch2+o=co+h2                     6.000E+13      0.0         0.0
ch2+h=ch+h2                     3.500E+14      0.0         0.0
ch2+o2=hco+oh                   4.300E+10      0.0      -500.0
ch2+o2=co2+h2                   3.450E+11      0.0      1000.0
ch2+o2=co2+h+h                  1.600E+12      0.0      1000.0
ch2+o2=co+h2o                   1.870E+10      0.0     -1000.0
ch2+o2=co+oh+h                  8.640E+10      0.0      -500.0
ch2+o2=ch2o+o                   5.000E+13      0.0      9000.0
ch2+co2=ch2o+co                 1.100E+11      0.0      1000.0
ch2+ch2=c2h2+h2                 3.200E+13      0.0         0.0
ch2+ch2=c2h2+h+h                4.000E+13      0.0         0.0
ch2+ch3=c2h4+h                  4.000E+13      0.0         0.0
ch2+ch=c2h2+h                   4.000E+13      0.0         0.0
ch2+c2h2=h+c3h3                 1.200E+13      0.0      6620.0
ch2+c2h4=c3h6                   4.300E+12      0.0     10038.0
ch2+c2h6=ch3+c2h5               6.500E+12      0.0      7911.0


!****************
! sch2 reactions
!****************

sch2+m=ch2+m                    1.000E+13      0.0         0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
```

```
sch2+o2=co+oh+h                 3.000E+13      0.0         0.0
sch2+h2=ch3+h                   7.000E+13      0.0         0.0
sch2+h=ch2+h                    2.000E+14      0.0         0.0
sch2+h=ch+h2                    3.000E+13      0.0         0.0
sch2+o=co+h+h                   1.500E+13      0.0         0.0
sch2+o=co+h2                    1.500E+13      0.0         0.0
sch2+oh=ch2o+h                  3.000E+13      0.0         0.0
sch2+ho2=ch2o+oh                3.000E+13      0.0         0.0
sch2+h2o2=ch3o+oh               3.000E+13      0.0         0.0
sch2+h2o(+m)=ch3oh(+m)          4.820E+17     -1.2      1145.0
    LOW/1.880E+38 -6.36 5040.0/
    TROE /0.6027 208 3922 10180/
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
sch2+ch2o=ch3+hco               1.200E+12      0.0         0.0
sch2+hco=ch3+co                 1.800E+13      0.0         0.0
sch2+ch3=c2h4+h                 1.800E+13      0.0         0.0
sch2+ch4=ch3+ch3                4.000E+13      0.0         0.0
sch2+c2h6=ch3+c2h5              1.200E+14      0.0         0.0
sch2+c2h4=ac3h5+h               1.300E+14      0.0         0.0
sch2+c2h2=c3h3+h                1.800E+14      0.0         0.0
sch2+h2o=ch2+h2o                3.000E+13      0.0         0.0
sch2+co2=ch2o+co                3.000E+12      0.0         0.0
sch2+ch2co=c2h4+co              1.600E+14      0.0         0.0


!*************
! ch reactions
!*************

ch+oh=hco+h                     3.000E+13      0.0         0.0
ch+o=co+h                       1.800E+14      0.0         0.0
ch+o=C+oh                       1.800E+14      0.0         0.0
ch+o2=hco+o                     1.000E+13      0.0         0.0
ch+o2=co+oh                     1.000E+13      0.0         0.0
ch+co2=hco+co                   3.400E+12      0.0       690.0
ch+h2o=ch2o+h                   1.710E+13     -0.00     -755.0
ch+ch4=c2h4+h                   6.000E+13      0.0         0.0
ch+ch3=c2h3+h                   3.000E+13      0.0         0.0


!****************
!ch3oh reactions
!****************

ch3+oh(+m)=ch3oh(+m)            5.650E+13      0.1         0.0
    LOW /5.75E+41 -7.4 626.0/
    TROE /0.025 1.0E-15 8000.0 3000.0/
h2o/16.00/ co/2.00/ co2/3.00/ h2/2.00/ ar/0.75/
ch3oh(+m)=ch2oh+h(+m)           2.690E+16     -0.1     98940.0
    LOW /2.34E+40 -6.33 103100.0/
    TROE /0.773 693.0 5333.0 1.0E-10/
ch3oh+o2=ch2oh+ho2              2.050E+13      0.0     44910.0
ch3oh+o2=ch3o+ho2               2.500E+12      0.0     55000.0
ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2            4.820E+10      0.0     12580.0
ch3oh+oh=ch2oh+h2o              1.300E+13      0.0      5960.0
ch3oh+oh=ch3o+h2o               1.300E+13      0.0      5960.0
ch3oh+o=ch2oh+oh                1.630E+13      0.0      5030.0
ch3oh+h=ch2oh+h2                3.200E+13      0.0      6095.0
ch3oh+h=h2+ch3o                 8.000E+12      0.0      6095.0
ch3oh+h=ch3+h2o                 1.700E+13      0.0      5311.0
ch3oh+ch2o=ch3o+ch3o            1.550E+12      0.0     79570.0
ch3oh+ch3=ch2oh+ch4             3.570E+11      0.00     8663.0
ch3oh+ch3=ch3o+ch4              4.680E+05      2.3     12764.0
```

```
!****************
!ch2oh reactions
!****************

ch2oh+m=ch2o+h+m                1.000E+14      0.0     25100.0
h2o/1.00/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch2oh+h=ch2o+h2                 3.000E+13      0.0         0.0
ch2oh+o2=ch2o+ho2               2.170E+14      0.0      4690.0
ch2oh+o=ch2o+oh                 4.200E+13      0.0         0.0
ch2oh+ho2=ch2o+h2o2             1.200E+13      0.0         0.0
ch2oh+hco=ch3oh+co              1.000E+13      0.0         0.0


!************************
! mEThOXY ch3o reactions
!************************

ch3o+m=ch2o+h+m                 4.880E+15      0.0     22773.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch3o+ho2=ch2o+h2o2              3.000E+11      0.0         0.0
ch3o+oh=ch2o+h2o                1.000E+13      0.0         0.0
ch3o+o=ch2o+oh                  1.300E+13      0.0         0.0
ch3o+h=ch2o+h2                  2.000E+13      0.0         0.0
ch3o+o2=ch2o+ho2                2.350E+10      0.0      1788.0
ch3o+ch2o=ch3oh+hco             1.150E+11      0.0      1280.0
ch3o+co=ch3+co2                 1.570E+13      0.0     11804.0
ch3o+hco=ch3oh+co               9.000E+13      0.0         0.0
ch3o+c2h5=ch2o+c2h6             2.410E+13      0.0         0.0
ch3o+c2h3=ch2o+c2h4             2.410E+13      0.0         0.0
ch3o+c2h4=ch2o+c2h5             1.200E+11      0.0      7000.0


!******************************
! ch3o2 methylperoxy reactions
!******************************

ch3o2+ho2=ch3o2h+o2             2.903E+11      0.0      1552.0 !
Raventos-Duran 2007
ch3o2h+oh=ch3o2+h2o             1.150E+12      0.0      -380.0
ch3o2h+o=oh+ch3o2               2.000E+13      0.0      4750.0

ch3o2h+h=ch3o2+h2               8.800E+10      0.0      1860.0
ch3o2h+h=ch3o+h2o               8.200E+10      0.0      1860.0


ch2o+ch3o2=hco+ch3o2h           2.000E+12      0.0     11700.0
ch3o2+ch4=ch3+ch3o2h            1.800E+11      0.0     18500.0
ch3o2+ch3oh=ch2oh+ch3o2h        1.800E+12      0.0     13712.0
ch3o2+ho2=ch2o+h2o+o2           1.800E+10      0.0     -1431.0
ch3o2+ch3o2=ch2o+ch3oh+o2       1.050E+09      0.0     -3589.0
ch3o2+ch3o2=ch3o+ch3o+o2        7.740E+10      0.0       -61.0
ch3o2+c2h6=ch3o2h+c2h5          2.950E+11      0.0     15000.0
ch3o2+ch3=ch3o+ch3o             1.000E+12      0.0     -1411.0
ch3o2+oh=ch3oh+o2               6.000E+13      0.0         0.0
ch3o2+h=ch3o+oh                 9.600E+13      0.0         0.0
ch3o2+h2o2=ch3o2h+ho2           2.410E+12      0.0      9936.0
```

```
ch3o2+o=ch3o+o2                 3.600E+13      0.0         0.0
ch3o2+ch3o=ch3o2h+ch2o          3.000E+11      0.0         0.0
ch3o2+ch2oh=ch2o+ch3o2h         1.200E+13      0.0         0.0
ch3o2+c2h5o2=o2+ch3o+c2h5o      7.740E+10      0.0       -61.0

ch3o2h=ch3o+oh                  6.300E+14      0.0     42300.0
ch3o2h(+m)=ch3o+oh(+m)          4.050E+19     -1.153   44255.0 !
Jasper et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 279-286
                        LoW / 6.460E+18     -7.502   46761.0/
     TroE / 0.8375 36562 498.8 9990.0/


!************************
! mEThANAL ch2o reactions
!************************

ch2o+oh=hco+h2o                         1.716E+09      1.18    -447.0
! Tsang-hampson 1986
ch2o+ch3=hco+ch4                        7.800E-08      6.10    1970.0
ch2o+m=hco+h+m                          5.850E+14      0.00   64200.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch2o+ho2=hco+h2o2                       2.200E+06      2.00   12000.0
!ch2o+ho2=hco+h2o2                       4.110E+04      2.50   10210.0
! Eiteneer et al
ch2o+o=hco+oh                           1.810E+13      0.00    3088.0
ch2o+h=hco+h2                           1.100E+08      1.80    3000.0
ch2o+o2=hco+ho2                         1.230E+06      3.00   52000.0
ch2o+o2cho=hco+ho2cho                   1.990E+12    0.00   11660.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
                                rev /  2.331E+02    2.30    4687.0 /


!*********************************************************************
*************************
!*********************************************************************
*************************
!****************************************** BASE c2
*****************************************
!*********************************************************************
*************************
!*********************************************************************
*************************

!**********************
! EThANE c2h6 reactions
!**********************

c2h6+ho2=c2h5+h2o2                      8.000E+11   0.0   17600.0
c2h6+oh=c2h5+h2o                        5.110E+06   2.06    854.0
c2h6+o=c2h5+oh                          9.990E+08   1.50   5803.0 !
(92BAU/COB)
c2h6+h=c2h5+h2                          5.250E+14   0.0   12800.0 !
(CAO/BACK84)
c2h6+o2=c2h5+ho2                        1.000E+13   0.0   51000.0 !(73
TAY/DON)
c2h6+ch3o=c2h5+ch3oh                   3.020E+11   0.0    7000.0 !
(BENSON 82)
c2h6+ch3=c2h5+ch4                       7.536E+00   3.727  9883.0 !
(FIT 93)

!**********************
! EThYL c2h5 reactions
!**********************
```

```
c2h5o2=c2h5+o2                          4.930E+50  -11.50   42250.0
          rev / 1.090E+48 -11.54 1.022E+04 /
!c2h5+ho2=c2h5o+oh                       3.200E+13    0.00       0.0
!          rev / 3.075E+15 -0.32 2.749E+04 /
c2h5+ho2=c2h5o+oh                       1.900E+12    0.00   -1200.0
ch3o2+c2h5=ch3o+c2h5o                   7.000E+12    0.00   -1000.0
          rev / 6.569E+16 -0.90 3.126E+04 /
c2h5o2=c2h4o2h                          5.640E+47  -11.44   37320.0
          rev / 6.990E+48 -12.22 2.585E+04 /
!c2h5+o2=c2h4+ho2                          8.400E+11    0.00
3900.0 !Base DCPR
c2h5+ho2=c2h4+h2o2                      1.790E+12    0.00       0.0 !
Dobis et Benson (1993)
c2h5+oh=c2h4+h2o                        2.409E+13    0.00       0.0 !
(TSAnG hAMPSon 86)
c2h5+oh=>ch3+ch2o+h                     2.409E+13    0.00       0.0 !
(TSAnG hAMPSon 86)
c2h5+o=ch2o+ch3                         4.238E+13    0.00       0.0 !
(SLAGLE 88)
c2h5+o=ch3hco+h                         5.298E+13    0.00       0.0 !
(SLAGLE 88)
c2h5+o=c2h4+oh                          3.046E+13    0.00       0.0 !
(SLAGLE 88)
c2h5+h=c2h4+h2                          1.250E+14    0.00    8000.0 !
(KiEFER 82)
c2h5+ch3=c2h4+ch4                       1.144E+12    0.00       0.0 !
(BAULch 92)
c2h5+c2h5=c2h4+c2h6                     1.400E+12    0.00       0.0 !
(WarnATZ 84)
!c2h5+o2=c2h4o2h                         2.370E+42   -9.65   16150.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
!c2h5+o2=ch3hco+oh                       6.930E+17   -2.171  14020.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
c2h4+h(+M)=c2h5(+M)                     3.973E+09    1.283   1292.0 !
(94BAU/coB)
                                  LoW / 2.791E+18    0.00     755.0/
     TroE / 0.76 40.0 1025.0/

!**********************
! EThENE c2h4 reactions
!**********************

c2h4+h2=ch3+ch3                         3.767E+12    0.83   84710.0
          rev / 1.000E+14 0.00 3.200E+04 /
c2h4+ho2=c2h4o+oh                       2.230E+12    0.00   17190.0
          rev / 3.518E+17 -1.16 3.967E+04 /
!hco+c2h4=c2h3+ch2o                          9.000E+10    0.00
5400.0 !Base DCPR
!c2h4+M=c2h2+h2+M                        3.000E+17    0.00   79350.0 !
(JUST,RoTh 77)      h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/
c2h6/16.25/
 c2h4(+m) = c2h2+h2(+m)  1.800E+13   0.00  7.600E+04
!          rev / 1.877E+11 0.17 3.478E+04 /
          low / 1.500E+15 0.00 5.5443E+04 /
c2h4+M=c2h3+h+M                         2.970E+17    0.00   96560.0 !
(JUST,RoTh 77)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/
!c2h4+ho2=c2h4o2h                        2.000E+11    0.00    8000.0 !
(MarinoV94)
c2h4+ho2=c2h4o2h                        4.130E+04    2.232  13490.0 !
Chen Bozelli 2000
rev / 3.890E+10  0.481  18870.0 /
c2h4+oh=c2h3+h2o                        2.024E+13    0.00    5936.0 !
```

```
(TULLY 88)
c2h4+o=ch3+hco                          1.200E+08    1.44     530.0 !
(FonTiJn 87)
c2h4+o=ch2hco+h                         2.000E+08    1.44     530.0 !
(FonTiJn 87)
c2h4+h=c2h3+h2                          1.000E+14    0.00   15009.0 !
(MAn/LoU 88)
!c2h4+o2=c2h3+ho2                        4.000E+13    0.00   61500.0 !
(WALKER 77)
c2h4+o2=c2h3+ho2                        4.220E+13    0.00   57629.0 !
Tsang 1986
c2h4+c2h4=c2h5+c2h3                     5.000E+14    0.00   64700.0 !
(BEnSon 67)
c2h4+ch3=c2h3+ch4                       6.630E+00    3.70    9499.0 !
(24/08/2000 Tsang 86 *0.15-0.57)

c2h4+ho2=c2h3+h2o2                      4.800E+04    2.50   27622.0 !
Scott and Walker 2002


!*********************
! VINYL c2h3 reactions
!*********************

c2h3+ho2=>ch3+co+oh                     3.000E+13    0.00       0.0 !
(TSANG hAmPSON 86)
c2h3+oh=c2h2+h2o                        3.000E+13    0.00       0.0 !
(TSANG hAmPSON 86)
c2h3+h=c2h2+h2                          3.000E+13    0.00       0.0 !
(hEINEmANN 88)
c2h3+o=ch3+co                           1.500E+13    0.00       0.0 !
(hEINEmANN 88)
c2h3+o=ch2co+h                          1.500E+13    0.00       0.0 !
(hEINEmANN 88)
c2h3+ch=ch2+c2h2                        5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c2h3+ch2=ac3h4+h                        3.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c2h3+ch3=c2h2+ch4                       3.910E+11    0.00       0.0 !
(TSANG/hAmPSON 86)
c2h3+c2h6=c2h4+c2h5                     1.500E+13    0.00   10000.0 !
(hIDAKA 85)
c2h3+c2h=c2h2+c2h2                      9.640E+11    0.00       0.0 !
(TSANG/hAmPSON 86)
c2h3+c2h2=c4h4+h                        2.000E+12    0.00    5000.0 !
(89 FAhR/STE)
c2h3+hco=c2h4+co                        9.034E+13    0.00       0.0 !
(TSANG hAmPSON 86)
c2h3+ch2o=c2h4+hco                      5.420E+03    2.81    5862.0 !
(TSANG hAmPSON 86)
c2h3+c2h3=c2h2+c2h4                     1.084E+13    0.00       0.0 !
(FAhR 298K   90)
c2h3+c2h3=c4h6                          5.000E+13    0.00       0.0 !
(FAhR 298K   90  )
c2h3+c2h4=c4h6+h                        1.270E+12    0.00    7305.0 !
c2h3+ch3=ac3h5+h                  4.73E+02  3.7   5677.0   ! (i)


!***************
!!c2h2 reactions
!***************

c2h2+oh(+m)=c2h2oh(+m)                  2.290E+13    0.00    1808.0 !
(FULLE: BER.BUNSENGES.P.C. 101, 1433 (1997)
                                  LOW / 7.44E+26    -3.10    1808.0 /
                                  TROE/ 0.17 180.0 50000.0  12772.0 /
c2h2+o2=hcco+oh                         2.000E+08    1.50   30100.0 !
(mILLER 92)
c2h2+o2=c2h+ho2                         1.210E+13    0.00   74520.0 !
(TSANG86)
c2h2+ho2=ch2co+oh                       6.090E+09    0.00    7948.0 !
(TSANG 86)
c2h2+oh=c2h+h2o                         3.400E+07    2.00   14000.0 !
(mILLER88)
c2h2+oh=ch3+co                          4.840E-04    4.00   -2000.0 !
(mILLER88)
c2h2+oh=ch2co+h                         2.192E-04    4.50   -1000.0 !
(mILLER 88)
c2h2+oh=hccoh+h                         5.059E+05    2.30   13500.0 !
(mILLER 88)
c2h2+o=ch2+co                           1.980E+04    2.60     656.0 !
(87mAh/FONT 0.3)
c2h2+o=hcco+h                           4.620E+04    2.60     656.0 !
(87mAh/FONT 0.7)
c2h2+ch3=c2h+ch4                        1.800E+11    0.00   17290.0 !
(TSANG/hAmPSON86)
c2h2+h(+m)=c2h3(+m)                     2.340E+15   -0.90    3064.0 !
                                  LOW / 2.254E+40   -7.269   6577.0 /
                                  TROE/ 0.50  675  675/
h2o/5.00/ co/2.00/ co2/3.00/ h2/2.00/ ar/0.75/


!**************
!!c2h reactions
!**************

c2h+h2=c2h2+h                           1.506E+13    0.00    3100.0 !
(WARNATZ 84)
c2h+oh=hcco+h                           2.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 82)
c2h+o=co+ch                             1.000E+13    0.00       0.0 !
(WARNATZ 84)
c2h+o2=co+hco                           2.410E+12    0.00       0.0 !
(TSANG    86)


!***************
!c2h4o reactions
!***************

c2h4o=ch4+co                            1.210E+13    0.00   57200.0 !
(LIFShITZ 83)
c2h4o=ch3hco                            6.000E+13    0.00   57200.0 !
(LIFShITZ 83<)
c2h4o=ch3+hco                           4.900E+13    0.00   57200.0 !
(LIFShITZ 83>)
c2h4o+o2=c2h3o+ho2                      4.000E+13    0.00   61500.0 !
(=c2h4+o2)
c2h4o+h=c2h3o+h2                        2.000E+13    0.00    8300.0 !
(LIFShITZ 83)
c2h4o+h=c2h3+h2o                        5.000E+09    0.00    5000.0 !
(LIFShITZ 83)
c2h4o+h=c2h4+oh                         9.510E+10    0.00    5000.0 !
(LIFShITZ 83)
c2h4o+o=c2h3o+oh                        1.910E+12    0.00    5250.0 !
(BOGAN 78)
c2h4o+oh=c2h3o+h2o                      4.790E+13    0.00    5955.0 !
(90WILK/CERN)
c2h4o+ho2=c2h3o+h2o2                    4.000E+12    0.00   17000.0 !
(ESTD WALKER)
c2h4o+ch3=ch4+c2h3o                     1.070E+12    0.00   11830.0 !
(BALDWIN 84)

!*****************
!c2h4o2h reactions
!*****************

c2h4o2h=c2h4o+oh                        3.160E+11    0.00   19500.0 !
(MARINOV94)

!*****************
! Ethanol reactions
!*****************

c2h5oh(+M)=ch3+ch2oh(+M)                5.940E+23   -1.68   91163.0 !
Marinov 1998
                                  LOW / 2.880E+85  -18.90  109914.0 /
TROE /0.5 200. 890.  4600./
h2o/5./ h2/2.0/ co2/3.0/ co/2.0/

c2h5oh(+M)=c2h5+oh(+M)                  1.250E+23   -1.54   96005.0 !
Marinov 1998
                                  LOW / 3.252E+85  -18.81  114930.0 /
TROE/0.5 300. 900. 5000./
h2o/5./ h2/2.0/ co2/3.0/ co/2.0/

c2h5oh(+M)=c2h4+h2o(+M)                 2.790E+13    0.09   66136.0 !
Marinov 1998
                                  LOW / 2.570E+83  -18.85   86452.0 /
TROE / 0.70 350. 800. 3800. /
h2o/5./

c2h5oh(+M)=ch3hco+h2(+M)                7.240E+11    0.095  91007.0 !
Marinov 1998
                                  LOW / 4.460E+87  -19.42  115586.0 /
TROE / 0.9 900. 1100. 3500./
h2o/5./

c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2                   2.000E+13    0.00   52800.0 !
Curran 1998
           rev / 3.470E+08 0.32 -1.105E+03 /
c2h5oh+o2=ch3choh+ho2                   1.500E+13    0.00   50150.0 !
Curran 1998
           rev / 1.079E+09 0.63 -5.040E+02 /

c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o                   6.200E+03    2.68    -576.0 !
Xu Lin pci 2007 31 159-166
c2h5oh+oh=ch3choh+h2o                   1.306E+05    2.43   -1457.0 !
Xu Lin pci 2007 31 159-166
c2h5oh+oh=c2h5o+h2o                     2.810E+02    2.97    -580.0 !
Xu Lin pci 2007 31 159-166

c2h5oh+h=pc2h4oh +h2                    1.878E+03    3.20    7150.0 !
Park,Zhu,Lin, JcP 118, 9990-9996 (2003)
c2h5oh+h=ch3choh+h2                     1.794E+05    2.53    3420.0 !
Park,Zhu,Lin, JcP 118, 9990-9996 (2003)
c2h5oh+h=c2h5o+h2                       5.550E-23   10.60   -4459.0 !
Park,Zhu,Lin, JcP 118, 9990-9996 (2003)

c2h5oh+o=pc2h4oh +oh                    9.690E+02    3.23    4658.0 !
Wu, Lee, Xu, Lin, JPcA 2007
c2h5oh+o=ch3choh+oh                     1.450E+05    2.41     876.0 !
Wu, Lee, Xu, Lin, JPcA 2007
c2h5oh+o=c2h5o+oh                       1.460E-03    4.73    1727.0 !
Wu, Lee, Xu, Lin, JPcA 2007

c2h5oh+ch3=pc2h4oh+ch4                  3.300E+02    3.30   12291.0 !
Xu,Park,Lin, JcP 120, 6593-6599 (2004)
c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4                  1.990E+01    3.37    7635.0 !
Xu,Park,Lin, JcP 120, 6593-6599 (2004)
c2h5oh+ch3=c2h5o+ch4                    2.035E+00    3.57    7722.0 !
Xu,Park,Lin, JcP 120, 6593-6599 (2004)

c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2                 8.200E+03    2.55   10750.0 !
Marinov 1998
c2h5oh+ho2=pc2h4oh+h2o2                 1.230E+04    2.55   15750.0 !
Marinov 1998
c2h5oh+ho2=c2h5o+h2o2                   2.500E+12    0.00   24000.0 !
Marinov 1998

!***************
!c2h5o reactions
!***************

c2h5o+M=ch3hco+h+M                      1.160E+35   -5.89   25274.0 !
Marinov 1998
c2h5o+M=ch3+ch2o+M                      1.350E+38   -6.96   23800.0 !
Marinov 1998
c2h5o+o2=ch3hco+ho2                     4.000E+10    0.00    1100.0 !
hartmann 1990
c2h5o+co=c2h5+co2                       4.680E+02    3.16    5380.0 !
Marinov 1998
c2h5o+h=ch3+ch2oh                       3.000E+13    0.00       0.0 !
Marinov 1998
c2h5o+h=c2h4+h2o                        3.000E+13    0.00       0.0 !
Marinov 1998
c2h5o+oh=ch3hco+h2o                     1.000E+13    0.00       0.0 !
Marinov 1998

!***************
! ch3choh reactions
!***************

ch3choh+o2=ch3hco+ho2                   1.000E+13    0.00    5564.0 !
Natarajan Bhaskaran pisstw 1982 13 834
ch3choh+ch3=c3h6+h2o                    1.000E+13    0.00       0.0 !
Marinov 1998
ch3choh+o=ch3hco+oh                     1.000E+14    0.00       0.0 !
Marinov 1998
ch3choh+h=c2h4+h2o                      3.000E+13    0.00       0.0 !
Marinov 1998
ch3choh+h=ch3+ch2oh                     3.000E+13    0.00       0.0 !
Marinov 1998
ch3choh+ho2=ch3hco+oh+oh                4.000E+13    0.00       0.0 !
Marinov 1998
ch3choh+oh=ch3hco+h2o                   5.000E+12    0.00       0.0 !
Marinov 1998
ch3choh+M=ch3hco+h+M                    1.000E+14    0.00   25000.0 !
Marinov 1998

!***************
! pc2h4oh reactions
!***************

c2h4+oh=pc2h4oh                         1.290E+12    0.00    -817.0 !
Atkinson 1986
```

```
pc2h4oh+o2=o2c2h4oh                     1.000E+12    0.00   -1100.0 !
Marinov 1998
o2c2h4oh=ch2o+ch2o+oh                   6.000E+10    0.00   24500.0 !
Marinov 1998

!****************
!c2h5o2 reactions
!****************

c2h5o2+ch3=c2h5o+ch3o                   8.170E+12    0.00    -906.0
c2h5o2=c2h4+ho2                         3.570E+04    2.32   27955.0 !
miller/2
c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2                   3.400E+11    0.00   -1300.0
c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+hco                 1.990E+12    0.00   11660.0
c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h                2.230E+12    0.00   17190.0
ch4+c2h5o2=ch3+c2h5o2h                  1.810E+11    0.00   18480.0
ch3oh+c2h5o2=ch2oh+c2h5o2h              1.810E+12    0.00   13710.0
c2h6+c2h5o2=c2h5+c2h5o2h                1.320E+13    0.00   20470.0
c2h4o+c2h5o2=c2h3o+c2h5o2h              1.130E+13    0.00   30430.0
c3h6+c2h5o2=ac3h5+c2h5o2h               3.240E+11    0.00   14900.0
c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7               1.700E+13    0.00   20460.0
c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7               2.000E+12    0.00   17000.0
c4h8+c2h5o2=Cc4h7-1+c2h5o2h             1.400E+12    0.00   14900.0
c2h5o2+c2h5o2=c2h5o+c2h5o+o2            1.400E+16   -1.61    1860.0


!****************
!c2h5o2h reactions
!****************

c2h5o2h=c2h5o+oh                        4.000E+15    0.00   42900.0
c2h5o2h+o=oh+c2h5o2                     2.000E+13    0.00    4750.0
c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o                   2.000E+12    0.00    -370.0

c2h5o2h+h=ch3hco+oh+h2                  3.200E+13    0.00    7700.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+ch3=ch3hco+oh+ch4               5.700E+11    0.00    8700.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+c2h5=ch3hco+oh+c2h6             3.400E+11    0.00   11400.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+oh=ch3hco+oh+h2o                5.900E+12    0.00     900.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+hco=ch3hco+oh+ch2o              1.800E+12    0.00   16700.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+ch3o=ch3hco+oh+ch3oh            6.300E+11    0.00    5500.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+ho2=ch3hco+oh+h2o2              8.000E+11    0.00   16200.0 !
Ranzi 94


!*****************
! ch2hco reactions
!*****************

ch2hco+o2=ch2co+ho2                     1.580E+10    0.00       0.0 !
(mARINOV94)
ch2hco+o2=ch2o+co+oh                    2.510E+10    0.00       0.0 !
(mARINOV94)
ch2hco+o2=oh+chocho                     2.510E+11    0.00   14640.0 !
(mARINOV94)
ch2hco+o=ch2o+hco                       3.980E+13    0.00       0.0 !
(mARINOV94)
ch2hco+ho2=ch2o+hco+oh                  1.000E+13    0.00       0.0 !
(mARINOV94)
```

```
ch2hco+oh=ch2co+h2o                     2.000E+13    0.00       0.0
h+ch2co(+m)=ch2hco(+m)                  4.860E+11    0.40   -1755.0 !
                                  LOW / 1.012E+42   -7.63    3854.0 /
                                  TROE/ 0.465  201  1773  5333/
h2o/6.00/ co/1.50/ co2/2.00/ ch4/2.00/ c2h5/3.00/ h2/2.00/ ar/0.75/

ch2hco+h=ch2co+h2                 4.00E+13  0.0       0.0  ! MarinoV
1996
ch2hco+ch3=>c2h5+co+h             4.90E+14 -0.50      0.0  !   (L)


!****************
! ch2co reactions
!****************

ch2co+m=ch2+co+m                        3.600E+15    0.00   59270.0 !
(WARNATZ84)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch2co+o2=ch2o+co2                       2.000E+13    0.00   61500.0 !
(DAGAUT 90 c2h4/2)
ch2co+ho2=>ch2o+co+oh                   6.000E+11    0.00   12738.0 !
(PILLING 90)
ch2co+o=ch2+co2                         1.760E+12    0.00    1349.0 !
(WAShIDA 83)
ch2co+o=hcco+oh                         1.000E+13    0.00    8000.0 !
(mILLER 82)
ch2co+oh=ch2oh+co                       6.930E+12    0.00       0.0 !
(BAULCh92 68%)
ch2co+oh=hco+ch2o                       2.040E+11    0.00       0.0 !
(BAULCh92 2%)
ch2co+oh=hcco+h2o                       1.020E+11    0.00       0.0 !
(BAULCh92 1%)
ch2co+oh=ch3+co2                        3.100E+12    0.00       0.0 !
(BAULCh92 27%)
ch2co+h=ch3+co                          1.500E+04    2.83     673.0 !
(FIT NIST93)
ch2co+h=hcco+h2                         1.800E+14    0.00    8600.0 !
(hIDAKA94)
ch2co+ch3=c2h5+co                       6.000E+10    0.00       0.0 !
(hIDAKA94/1.5)
ch2co+ch3=hcco+ch4                      7.500E+12    0.00   13000.0 !
(hIDAKA94)
ch2co+ch2=hcco+ch3                      1.000E+12    0.00       0.0 !
(hIDAKA94)
ch2co+ch2=c2h4+co                       3.600E+13    0.00   11000.0 !
(hIDAKA94)

ch+ch2o=ch2co+h                   9.46E+13  0.0   -515.0   ! MiLLER
1992


!****************
! chocho reactions
!****************

chocho(+m)=ch2o+co(+m)                  4.270E+12    0.00   50600.0 !
marinov 1995
                                  LOW / 8.91E+16     0.00   49200.0 /
! marinov 1995

chocho(+m)=co+co+h2(+m)                 1.072E+14    0.00   55100.0 !
(mARINOV94, SAITO:JPC 88, 1182 (1984)
                                  LOW / 2.57E+16     0.00   38400.0 /
```

```
chocho+oh=choco+h2o                     1.000E+13    0.00       0.0 !
(mARINOV94)
chocho+o=choco+oh                       7.240E+12    0.00    1970.0 !
(mARINOV94)
chocho+h=ch2o+hco                       1.000E+12    0.00       0.0 !
(mARINOV94)
chocho+ho2=choco+h2o2                   1.700E+12    0.00   10700.0 !
(mARINOV94)
chocho+ch3=choco+ch4                    1.740E+12    0.00    8440.0 !
(mARINOV94)
chocho+o2=hco+co+ho2                    6.300E+13    0.00   30000.0 !
(mARINOV94)

!****************
! choco reactions
!****************

choco=hco+co                            2.000E+07    0.00       0.0 !
(mARINOV94)
!choco+o2=co+co+ho2                      3.980E+12    0.00   30000.0 !
(mARINOV95)
choco+o2=co+co+ho2                      6.300E+13    0.00   30000.0 !

!****************
!c2h3o reactions
!****************

c2h3o=ch2co+h                           1.600E+13    0.00   35000.0 !
(=ch2hco/NIST)
c2h3o=ch3co                             8.511E+14    0.00   14000.0 !
(90WILK/CER)

!****************
!c2h2oh reactions
!****************

c2h2oh=ch2co+h                          5.000E+15    0.00   28000.0 !
(mILLER82)
c2h2oh+h=ch2co+h2                       2.000E+13    0.00    4000.0 !
(mILLER82)
c2h2oh+o=ch2co+oh                       2.000E+13    0.00    4000.0 !
(mILLER82)
c2h2oh+oh=ch2co+h2o                     1.000E+13    0.00    2000.0 !
(mILLER82)
c2h2oh+o2=>hco+co2+h2                   4.000E+12    0.00    -250.0 !
(GUTmANc2h3+o2)

!****************
!hccoh reactions
!****************

hccoh+h=ch2co+h                         1.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 88)

!****************
!hcco reactions
!****************

hcco+m=ch+co+m                          6.000E+15    0.00   58821.0 !
(FRANK 86)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
hcco+oh=hco+co+h                        1.000E+13    0.00       0.0 !
```

```
(mILLER 82)
hcco+o=co+co+h                          1.930E+14    0.00     590.0 !
(VINCKIER 85)
hcco+h=sch2+co                          1.500E+14    0.00       0.0 !
(88FRA/RAh)
hcco+o2=co2+co+h                        4.780E+12   -0.42    1150.0 !
(mILLER 92)
hcco+ch2=c2h+ch2o                       1.000E+13    0.00    2000.0 !
(mILLER 82)
hcco+ch2=c2h3+co                        3.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 82)
hcco+c2h2=c3h3+co                       1.000E+11    0.00    3000.0 !
(mILLER 92)
hcco+ch=c2h2+co                         5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
hcco+hcco=c2h2+co+co                    1.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)

hcco+o=ch+co2                     2.95E+13  0.0    1113.0  ! PEETERS
1995


!****************
! ch3hco reactions
!****************

ch3hco=ch3+hco                          2.450E+16    0.00   84128.0 !
ch3hco+ho2=ch3co+h2o2                   1.700E+12    0.00   10700.0 !
(COLKET 77)
ch3hco+oh=ch3co+h2o                     2.350E+10    0.73   -1113.0 !
(BAULCh92)
ch3hco+o=ch3co+oh                       5.850E+12    0.00    1808.0 !
(BAULCh92)
ch3hco+h=ch3co+h2                       4.100E+09    1.16    2405.0 !
(BAULCh92)
ch3hco+o2=ch3co+ho2                     3.010E+13    0.00   39150.0 !
Baulch 92
ch3hco+ch3=ch3co+ch4                    1.700E+12    0.00    8440.0 !
(BEELY/hUNT76)
ch3hco+hco=ch3co+ch2o                   7.800E+13    0.00    8440.0 !
(DAGAUT95)
!ch3hco+o2=ch2hco+ho2                    1.000E+13    0.50   46000.0

ch3o2+ch3hco=ch3o2h+ch3co               3.010E+12    0.00   11930.0
                                  rev / 2.519E+13   -0.51    8991.0 /
ch3hco+ch3co3=ch3co+ch3co3h             3.010E+12    0.00   11930.0
                                  rev / 1.955E+12    0.02   26810.0 /
ch3hco+oh=ch3+hocho                     3.000E+15   -1.08       0.0
                                  rev / 5.350E+19   -1.68  119800.0 /


!****************
! ch3co reactions
!****************

ch3co+m=ch3+co+m                        8.640E+15    0.00   14400.0 !
(WILK89)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/

ch3co+o2=ch3co3 1.200E+11  0.00  -1100.0
ch3co3+ho2=ch3co3h+o2 1.750E+10  0.00 -3275.0
ch3co3h=ch3co2+oh 5.010E+14  0.00 40150.0
ch3co2+m=ch3+co2+m  4.400E+15  0.00 10500.0
```

```
!**************
! c2o reactions
!**************

c2o+o2=co+co+o                           2.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c2o+oh=co+co+h                           2.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c2o+o=co+co                              5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c2o+h=ch+co                              5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)

!**************
! c2 reactions
!**************

c2+o2=co+co                              5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c2+oh=c2o+h                              5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c2+h2=c2h+h                              4.000E+05    2.40    1000.0 !
(mILLER 92)



c2h2+ch3=pc3h4+h                         4.785E+03    2.42   12893.0 !
Nicolle
c2h2+ch3=ac3h5                           1.396E+04    2.21   16502.0 !
Nicolle
c2h2+ch3=sc3h5                           3.853E+56  -13.67   27892.0 !
Nicolle

h+c2h5(+m)=c2h6(+m)                      5.210E+17   -0.99    1580.0 !
GRI mECh2.11
                                   LOW / 1.990E+41   -7.08    6685.0 /
                                   TROE/ .8422 125.0  2219.0  6882.0 /
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/

h+c2h(+m)=c2h2(+m)                       1.000E+17   -1.00       0.0 !
GRI2.11
                                   LOW / 3.750E+33   -4.80    1900.0 /
                                   TROE/ 0.6464 132.0 1315.0  5566.0 /
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/


sc4h9(+m)=c3h6+ch3(+m)                   2.268E+48  -10.53   45869.0 !
SLAGLE94
                                   LOW / 9.933E+51  -10.50   34989.0/
                                   TROE/ 0.371 1.0E-15 574.0  2539.0 /
! TROE /Fc=0.371 exp(-T/950)+23.9 exp(-7616/T) format autre que
chemkin /

c2h3+c2h2(+m)=ic4h5(+m)                  1.000E+04    2.35   17900.0 !
94WAN/FRE
                                   LOW / 2.600E+38   -7.41    7500.0 /

ic4h5(+m)=c4h4+h(+m)                     1.000E+14    0.00   50000.0 !
92mIL/mEL
                                   LOW / 2.000E+15    0.00   42000.0/
nc4h5(+m)=c4h4+h(+m)                     1.000E+14    0.00   37000.0 !
```

```
92mIL/mEL
                                   LOW / 1.000E+14    0.00   30000.0/
ic4h3(+m)=c4h2+h(+m)                     1.000E+14    0.00   55000.0 !
92mILL/mEL
                                   LOW / 2.500E+15    0.00   48000.0/
nc4h3(+m)=c4h2+h(+m)                     1.000E+14    0.00   36000.0 !
92mILL/mEL
                                   LOW / 1.000E+14    0.00   30000.0/


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€        SOUS-mECANISmE C3
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!***********************
! c3h8 Propane reactions
!***********************

ch2+c3h8=ch3+ic3h7                       2.190E+12    0.00    6405.0 !
(DOBE 85)
ch2+c3h8=ch3+nc3h7                       1.790E+12    0.00    6405.0 !
(DOBE 85)
ch3+c2h5(+m)=c3h8(+m)                    4.900E+14   -0.50       0.0 !
DAVIS/LAW/WANG
                                    LOW /6.800E+61  -13.42    6000.0 /
                                   TROE /1.0 1000 1434 5329/
c3h8+o2=nc3h7+ho2                        4.000E+13    0.00   50872.0 !
(WALKER 75 EST)
c3h8+o2=ic3h7+ho2                        4.000E+13    0.00   47500.0 !
(WALKER 75)
c3h8+ho2=nc3h7+h2o2                      4.760E+04    2.55   16494.0 !
(TSANG 88)
c3h8+ho2=ic3h7+h2o2                      9.640E+03    2.60   13910.0 !
(TSANG 88)
c3h8+oh=nc3h7+h2o                        3.160E+07    1.80     934.0 !
(CohEN 91)
c3h8+oh=ic3h7+h2o                        7.080E+06    1.90    -159.0 !
(CohEN 91)
c3h8+o=nc3h7+oh                          3.715E+06    2.40    5505.0 !
(CohEN 86)
c3h8+o=ic3h7+oh                          5.495E+05    2.50    3140.0 !
(CohEN 86)
c3h8+h=nc3h7+h2                          1.336E+06    2.54    6756.0 !
(TSANG 88)
c3h8+h=ic3h7+h2                          1.014E+04    2.88    2931.0 !
(FITNIST)
c3h8+ch3=nc3h7+ch4                       3.000E+12    0.00   11710.0 !
(WALKER 77 >)
c3h8+ch3=ic3h7+ch4                       8.070E+11    0.00   10110.0 !
(WALKER 77*RTI*1.35)
c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6                     3.160E+11    0.00   12300.0 !
(ALLARA 80)
c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6                     5.010E+10    0.00   10400.0 !
(ALLARA 80)
c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4                     6.000E+02    3.30   10502.0 !
(TSANG 88)
c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4                     1.000E+03    3.10    8829.0 !
```

```
(TSANG 88)
c3h8+ic3h7=nc3h7+c3h8                    1.000E+11    0.00   12900.0 !
(ALLARA 80)
c3h8+ac3h5=nc3h7+c3h6                    7.940E+11    0.00   20500.0 !
(ALLARA 80)
c3h8+ac3h5=ic3h7+c3h6                    7.940E+11    0.00   16200.0 !
(EBERT  83)
c3h8+ch3o=nc3h7+ch3oh                    3.180E+11    0.00    7050.0 !
(WALKER 75)
c3h8+ch3o=ic3h7+ch3oh                    7.200E+10    0.00    4470.0 !
(WALKER 75)

c3h8+o2cho=nc3h7+ho2cho                  5.520E+04    2.55   16480.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
c3h8+o2cho=ic3h7+ho2cho                  1.475E+04    2.60   13910.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004


!*********************************
! C3h7 reactions Prop-1-yl radical
!*********************************

!###############
!^^^^^^^^^^^^^^^
! c3h7 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^
!###############

!**************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
! 6) h, Oh, O decomposition
! 7) dismutation
!**************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

ic3h7=c2h4+ch3                           1.140E+11    0.00   31110.0 !
(FITNIST 02/00*RTI*2.6-0.2)
nc3h7=c2h4+ch3                           1.500E+13    0.00   30404.0 !
Nicolle

!nc3h7(+m)=c2h4+ch3(+m)                   1.230E+13   -0.10   30202.0 !
!                                   LOW / 5.545E+49  -10.00   35766.0 /
!
!                                   TROE/ 2.17 1.0E-15  251.0  1185.0 /
!h2o/5.00/ co/2.00/ co2/3.00/ h2/2.00/ ar/0.75/


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c3h6+h(+m)=nc3h7(+m)                     1.330E+13    0.00    3260.7 !
                                   LOW / 6.26E+38   -6.66     700.0 /
!
                                   TROE/ 1.0 1000.0  1310.0  48097.0 /
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/
```

```
c3h6+h(+m)=ic3h7(+m)                     5.700E+09    1.20     874.0 !
Seakins 1993
                                   LOW / 1.64E+54   -11.10    9364.0 /
! marinov 1996
                                   TROE/ 1.0  1.0E-15  260.0  3000.0 /
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

nc3h7+o2=c3h6+ho2                        1.000E+12    0.00    5020.0 !
(84 WAR)
ic3h7+o2=c3h6+ho2                        2.754E+10    0.00   -2151.0 !
(GULATI 88)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) h, oh, ho2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

oh+ic3h7=nc3h7oh                         5.900E+12    0.00       0.0  !
CO 5198 KB
ho2+ic3h7=nc3h7o2h                       4.800E+12    0.00       0.0  !
CO 5199 KB

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!nc3h7+o2=nc3h7o2                         4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003
!ic3h7+o2=ic3h7o2                         1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003

nc3h7o2=nc3h7+o2                         3.870E+18   -1.16   36080.0 !
Curran
rev / 4.520E+12  0.00  0.0 /
ic3h7o2=ic3h7+o2                         4.212E+16   -0.34   35910.0 !
Curran
rev / 7.540E+12  0.00  0.0 /


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) h, Oh, O decomposition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!


nc3h7+h=c2h5+ch3                         1.00E+14     0.00       0.0 !
TSANG 1988
ic3h7+h=c2h5+ch3                         5.00E+13     0.00       0.0 !
TSANG 1988
ic3h7+h=c3h6+h2                          3.614E+12    0.00       0.0
ic3h7+o=aceton+h                         4.818E+13    0.00       0.0
ic3h7+o=ch3hco+ch3                       4.818E+13    0.00       0.0

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 7) dismutation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

ch3o2+nc3h7=ch3o+nc3h7o                  1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+nc3h7=ic3h7o+nc3h7o              1.900E+12    0.00   -1200.0
nc3h7o2+nc3h7=nc3h7o+nc3h7o              1.900E+12    0.00   -1200.0
nc3h7+ho2=nc3h7o+oh                      1.900E+12    0.00   -1200.0
```

```
ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o                 1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+ic3h7=ic3h7o+ic3h7o             1.900E+12    0.00   -1200.0
nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o             1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7+ho2=ic3h7o+oh                     1.900E+12    0.00   -1200.0


!**********************************
! C3h7O reactions Propanoxy radical
!**********************************

nc3h7o=ethco+h                          2.510E+14    0.00   23400.0
nc3h7o=c2h5+ch2o                        1.00E+15     0.00   21600.0

ic3h7o=aceton+h                         2.000E+14    0.00   21500.0
ic3h7o=ch3+ch3hco                       3.980E+14    0.00   17200.0
ic3h7o+o2=aceton+ho2                    9.090E+09    0.00     390.0


!*****************
! C3h7o2 reactions
!*****************

ic3h7o2+acrol=c2h3co+ic3h7o2h           2.800E+12    0.00   13600.0
ic3h7o2+c2h4=c2h3+ic3h7o2h              1.130E+13    0.00   30430.0
ic3h7o2+ethco=ic3h7o2h+c2h5co           2.000E+11    0.00    9500.0
ic3h7o2+c2h6=ic3h7o2h+c2h5              1.700E+13    0.00   20460.0
ic3h7o2+ch2o=ic3h7o2h+hco               5.600E+12    0.00   13600.0
ic3h7o2+ch3hco=ic3h7o2h+ch3co           2.800E+12    0.00   13600.0
ic3h7o2+ch4=ch3+ic3h7o2h                1.120E+13    0.00   24640.0
ic3h7o2+h2=h+ic3h7o2h                   3.010E+13    0.00   26030.0
ic3h7o2+ch3oh=ch2oh+ic3h7o2h            6.300E+12    0.00   19360.0
ic3h7o2+ho2=ic3h7o2h+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+c2h5o+o2          5.000E+10    0.00       0.0
ic3h7o2+ic3h7o2=o2+ic3h7o+ic3h7o        5.000E+10    0.00       0.0
ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2        5.000E+10    0.00       0.0
!ic3h7o2+ch3co3=ic3h7o+ch3co2+o2        5.000E+10    0.00       0.0
ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2            1.000E+11    0.00       0.0
ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2                1.000E+11    0.00       0.0
ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+c2h5o               1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+ac3h5=ic3h7o+c3h5o              1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o                 1.900E+12    0.00   -1200.0
!ic3h7o2=c3h6ooh2-1                     1.780E+13    0.00   29700.0


nc3h7o2+acrol=c2h3co+nc3h7o2h           2.800E+12    0.00   13600.0
nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h              1.130E+13    0.00   30430.0
nc3h7o2+ethco=nc3h7o2h+c2h5co           2.000E+11    0.00    9500.0
nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5              1.700E+13    0.00   20460.0
nc3h7o2+ch2o=nc3h7o2h+hco               5.600E+12    0.00   13600.0
nc3h7o2+ch3hco=nc3h7o2h+ch3co           2.800E+12    0.00   13600.0
nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h                1.120E+13    0.00   24640.0
nc3h7o2+h2=h+nc3h7o2h                   3.010E+13    0.00   26030.0
nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h            6.300E+12    0.00   19360.0
nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+c2h5o+o2          5.000E+10    0.00       0.0
nc3h7o2+nc3h7o2=o2+nc3h7o+nc3h7o        5.000E+10    0.00       0.0
nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2            1.000E+11    0.00       0.0
nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2                1.000E+11    0.00       0.0
nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+c2h5o               1.900E+12    0.00   -1200.0
nc3h7o2+ac3h5=nc3h7o+c3h5o              1.900E+12    0.00   -1200.0
```

```
nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o                 1.900E+12    0.00   -1200.0

!nc3h7o2=c3h6ooh1-3                      7.420E+11    0.00   23900.0
!nc3h7o2=c3h6ooh1-2                      5.950E+12    0.00   27900.0

!!nc3h7o2=c3h6ooh1-3                     8.625E+08    1.00   28000.0
!!nc3h7o2=c3h6ooh1-2                     3.346E+09    1.00   32500.0

nc3h7o2=c3h6ooh1-3                      3.750E+10    0.00   24400.0 !
                                  rev / 5.312E+12   -0.56   11180.0 /
nc3h7o2=c3h6ooh1-2                      2.000E+11    0.00   26850.0
                                  rev / 1.905E+12   -0.17   17650.0 /
ic3h7o2=c3h6ooh2-1                      6.000E+11    0.00   29400.0
                                  rev / 1.700E+12   -0.54   14360.0 /


!******************
! C3h7o2h reactions
!******************

nc3h7o2h=nc3h7o+oh                      8.059E+19   -1.50   47000.0
ic3h7o2h=ic3h7o+oh                      8.423E+19   -1.44   46080.0


!******************
! c3h6ooh reactions
!******************

c3h6ooh1-2=c3h6o+oh                     1.250E+15   -1.19   17580.0
                                  rev / 4.965E+08    1.03   29090.0 /
c3h6ooh1-3=c3h6o1-3+oh                  4.310E+15   -1.31   18240.0
                                  rev / 1.192E+18   -1.52   33770.0 /
c3h6ooh2-1=c3h6o+oh                     3.460E+16   -1.61   18870.0
                                  rev / 2.787E+17   -1.52   33090.0 /

!c3h6ooh1-2=c3h6+ho2                     5.500E+14   -0.85   15260.0
!                                 rev / 6.466E+10    0.20    8279.0 /
!c3h6ooh2-1=c3h6+ho2                     2.440E+19   -2.14   18230.0
!                                 rev / 5.818E+22   -3.23   13960.0 /

c3h6ooh1-2=c3h6+ho2                     7.330E+09    0.646  17860.0 !
Chen Bozelli
                                  rev / 2.470E+04    2.132  12160.0 /
c3h6ooh2-1=c3h6+ho2                     3.650E+12    0.08   20320.0 !
Chen Bozelli
                                  rev / 7.740E+03    2.285  11080.0 /

c3h6ooh1-3=oh+ch2o+c2h4                 1.160E+17   -1.10   32570.0


!**********************
! c3h6ooh-o2 reactions
!**********************

!c3h6ooh1-2o2=c3h6ooh1-2+o2              3.879E+14    0.29   34150.0
!c3h6ooh1-3o2=c3h6ooh1-3+o2              3.162E+18   -1.32   34400.0
!c3h6ooh2-1o2=c3h6ooh2-1+o2              2.284E+12    0.79   33140.0

!c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2              1.840E+45  -11.10    6538.0
!c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2              4.820E+36   -8.23    5167.0
!c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2              4.820E+36   -8.23    5167.0

c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2              7.540E+12    0.00       0.0
                                  rev / 2.702E+20   -1.53   37610.0 /
```

```
c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2              4.520E+12    0.00       0.0
                                  rev / 1.213E+19   -1.32   35910.0 /
c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2              4.520E+12    0.00       0.0
                                  rev / 7.998E+18   -1.34   35930.0 /


!c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh                 2.965E+12    0.00   26700.0
!c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh                 2.470E+11    0.00   20900.0
!c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh                 1.485E+12    0.00   24900.0

c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh                 2.000E+11    0.00   26400.0
                                  rev / 1.418E+07    0.62   48360.0 /
c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh                 2.500E+10    0.00   21400.0
                                  rev / 4.447E+05    1.00   51030.0 /
c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh                 1.000E+11    0.00   23850.0
                                  rev / 2.142E+05    1.12   49190.0 /


!****************
! C3ket reactions
!****************

!c3ket12=ch3hco+hco+oh                   1.000E+16    0.00   43000.0
!c3ket13=ch2o+ch2hco+oh                  1.000E+16    0.00   43000.0
!c3ket21=ch2o+ch3co+oh                   1.000E+16    0.00   43000.0

c3ket12=ch3hco+hco+oh                   1.050E+16    0.00   41600.0
c3ket13=ch2o+ch2hco+oh                  1.500E+16    0.00   42000.0
c3ket21=ch2o+ch3co+oh                   1.500E+16    0.00   42000.0

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c3h6o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

!*********************************
! O-ring decomposition
!*********************************

c3h6o+h=h2+ch2coch3                     2.700E+07    2.00    5000.0 !
DOR 4947
c3h6o+oh=h2o+ch2coch3                   7.800E+06    2.00    -765.0 !
DOR 4948
c3h6o+ho2=h2o2+ch2coch3                 1.200E+12    0.00   15500.0 !
DOR 4949
c3h6o+ch3=ch4+ch2coch3                  6.000E+11    0.00    9600.0 !
DOR 4950
c3h6o+ch3o2=ch3o2h+ch2coch3             6.000E+11    0.00    9600.0 !
DOR 4951
c3h6o+c2h5=c2h6+ch2coch3                6.000E+11    0.00   11000.0 !
DOR 4952
c3h6o+o=oh+ch2coch3                     7.800E+13    0.00    5200.0 !
DOR 5103

!c3h6o1-3+h=>h2+hco+c2h4                 2.700E+07    2.00    5000.0
! DOR 4995
!c3h6o1-3+oh=>h2o+hco+c2h4               7.800E+06    2.00    -765.0
! DOR 4996
!c3h6o1-3+ho2=>h2o2+hco+c2h4             1.200E+12    0.00   15500.0
! DOR 4997
!c3h6o1-3+ch3=>ch4+hco+c2h4              6.000E+11    0.00    9600.0
! DOR 4998
!c3h6o1-3+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2h4         4.500E+12    0.00   17500.0
```

```
! DOR 4999
!c3h6o1-3+c2h5=>c2h6+hco+c2h4            6.000E+11    0.00   11000.0
! DOR 5000
!c3h6o1-3+o=>oh+hco+c2h4                 7.800E+13    0.00    5200.0
! DOR 5104

c3h6o=c2h5+hco                          2.450E+13     0.00  58500.0 !
Lifshitz,A.;Tamburu,C 1994
c3h6o=ethco                             1.820E+14     0.00  58500.0 !
Lifshitz,A.;Tamburu,C 1994
c3h6o=ch3+ch3co                         4.540E+13     0.00  59900.0 !
Lifshitz,A.;Tamburu,C 1994
c3h6o=ch3+ch2hco                        2.450E+13     0.00  58820.0 !
Lifshitz,A.;Tamburu,C 1994
c3h6o=ch3+c2h3o                         8.000E+15     0.00  92010.0 !
Lifshitz,A.;Tamburu,C 1994

c3h6o1-3+h=ch2ch2hco+h2                 2.700E+07     2.00   5000.0 !
c3h6o1-3+oh=ch2ch2hco+h2o               7.800E+06     2.00   -765.0 !
c3h6o1-3+ho2=ch2ch2hco+h2o2             1.200E+12     0.00  15500.0 !
c3h6o1-3+ch3=ch2ch2hco+ch4              6.000E+11     0.00   9600.0 !
c3h6o1-3+ch3o2=ch3o2h+ch2ch2hco         4.500E+12     0.00  17500.0  !
DOR 4999
c3h6o1-3+c2h5=c2h6+ch2ch2hco            6.000E+11     0.00  11000.0  !
DOR 5000
c3h6o1-3+o=oh+ch2ch2hco                 7.800E+13     0.00   5200.0  !
DOR 5104
c3h6o1-3=ethco                          1.820E+14     0.00  58500.0 !
idem c3h6o


!**********************
!c3h6 reactions Propene
!**********************

ac3h5+h(+m)=c3h6(+m)                    3.700E+14     0.00      0.0 !
TS5 600cm-1 ! k_opt=1.85*ko WANG
                                  LOW / 1.33E+60   -12.00   5967.8 /
                                  TROE/ 0.020  1096.6 1096.6 6859.5 /
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/

c3h6=sc3h5+h                            7.590E+14     0.00 101300.0 !
(86Nar/NIE)
c3h6=tc3h5+h                            1.450E+15     0.00  98060.0 !
(NAROZNIK 86)
c3h6=c2h3+ch3                           1.100E+21    -1.20  97720.0 !
(TSANG91)
c3h6=ch4+c2h2                           3.500E+12     0.00  70000.0 !
(92hID/NAK)
c3h6+o2=ac3h5+ho2                       1.950E+12     0.00  39000.0 !
(91STO/WAL)
c3h6+o2=sc3h5+ho2                       1.400E+13     0.00  60200.0 !
(WALKER77)
c3h6+o2=tc3h5+ho2                       7.000E+12     0.00  60200.0 !
(WALKER77)
c3h6+ho2=c3h6o+oh                       1.020E+12     0.00  14964.0 !
(WALKERSIC 90)
c3h6+ho2=ac3h5+h2o2                     1.500E+11     0.00  14190.0 !
(BALDWIN 84,EST)
c3h6+ho2=sc3h5+h2o2                     7.500E+09     0.00  12570.0 !
(WALKER 77,EST<)
c3h6+ho2=tc3h5+h2o2                     3.000E+09     0.00   9930.0 !
(WALKER 77,EST<)
c3h6+oh=ac3h5+h2o                       7.698E+05     2.214   622.0 !
```

```
(DAGAUT92)
c3h6+oh=sc3h5+h2o                    1.013E+13    0.00    5960.0 !
(DAGAUT92)
c3h6+oh=tc3h5+h2o                    1.110E+06    2.00    1450.0 !
(TSANG91)
c3h6+o=c2h5+hco                      4.689E+07    1.57    -628.0 !
(mAh/FON88 30/100)
c3h6+o=ch3+ch2hco                    3.900E+07    1.57    -628.0 !
(mAh/FON88 25/100)
c3h6+o=c2h4+ch2o                     7.020E+07    1.57    -628.0 !
(mAh/FON88 45/100)
c3h6+o=ac3h5+oh                      1.750E+11    0.70    5884.0 !
(TSANG91)
c3h6+o=sc3h5+oh                      1.200E+11    0.70    8960.0 !
(TSANG91)
c3h6+o=tc3h5+oh                      6.000E+10    0.70    7633.0 !
(TSANG91)
c3h6+h=c2h4+ch3                      7.230E+12    0.00    1302.0 !
(TSANG91)
c3h6+h=ac3h5+h2                      6.457E+12    0.00    4445.0 !
Konnov
c3h6+h=sc3h5+h2                      3.456E+14    0.00   17422.0 !
(TSANG91 030796)
c3h6+h=tc3h5+h2                      1.670E+14    0.00   14818.0 !
(TSANG91 030796)
c3h6+ch3=ac3h5+ch4                   1.600E+11    0.00    8800.0 !
(ALLARA 80)
c3h6+ch3=sc3h5+ch4                   3.300E+11    0.00   10110.0 !
(DAGAUT 88/2)
c3h6+ch3=tc3h5+ch4                   5.000E+10    0.00    8030.0 !
(DAGAUT 261090)
c3h6+c2h5=ac3h5+c2h6                 1.000E+11    0.00    9800.0 !
(EDELSON 80)
c3h6+c2h3=c4h6+ch3                   7.200E+11    0.00    5008.0 !
(91TSA)

c3h6+c2h3=ac3h5+c2h4                 2.210E+00    3.50    4682.0 !
c3h6+c2h3=tc3h5+c2h4                 2.210E+00    3.50    4682.0 !
c3h6+c2h3=sc3h5+c2h4                 2.210E+00    3.50    4682.0 !

c3h6+hco=ac3h5+ch2o                  1.08E+07     1.90   17010.0  !
TSAnG 1991

c3h6+o=ch2co+ch3+h                   2.500E+07    1.76  7.600E+01
                              rev / 1.000E+00    0.00  0.000E+00 /
c3h6+o=ch3chco+h+h                   2.500E+07    1.76  7.600E+01
                              rev / 0.000E+00    0.00  0.000E+00 /
c3h6+ch3o2=ac3h5+ch3o2h              3.240E+11    0.00 1.490E+04
                              rev / 2.000E+10    0.00 1.500E+04 /

!*****************
! c3h6oh reactions
!*****************

c3h6+oh=c3h6oh                       9.930E+11     0.00   -960.0 !
Curran
c3h6oh+o2=o2c3h6oh                   1.200E+11     0.00  -1100.0 !
Curran

!*******************
! o2c3h6oh reactions
!*******************

o2c3h6oh=ch3hco+ch2o+oh              1.250E+10     0.00  18900.0 !
```

```
Curran

!****************
! ac3h5 reactions
!****************

ac3h5+ho2=c3h5o+oh                   7.000E12      0.00  -1000.0 !
Curran
ac3h5+ch3o2=c3h5o+ch3o               7.000E12      0.00  -1000.0 !
Curran
                                rev / 1.994E+15    -0.74  17020.0 /
ac3h5+h=ac3h4+h2                     6.030E+12     0.00      0.0 !
(91TSA)
ac3h5+ch3=ac3h4+ch4                  1.000E+11     0.00      0.0 !
(DAGAUT 88)
ac3h5+ch2=c4h6+h                     3.000E+13     0.00      0.0 !
(91TSA)
ac3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                4.000E+11     0.00      0.0 !
(SChARFE 85)
ac3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                1.000E+12     0.00      0.0 !
(SChARFE 85)

ac3h5+o=acrol+h                      6.030E+13     0.00      0.0 !
Tsang 1991 J. Phys. Chem. Ref. Data vol. 20 pp. 221-273
ac3h5+hco=c3h6+co                    6.030E+13     0.00      0.0 !
Tsang 1991 J. Phys. Chem. Ref. Data vol. 20 pp. 221-273

ac3h5+o2=c2h2+ch2o+oh                9.710E+20    -2.70  24980.0 !
Lee Bozzelli 2005
ac3h5+o2=acrol+oh                    2.470E+13    -0.45  23017.0 !
Bozzelli and Dean 1993 10 bar
ac3h5+o2=ac3h4+ho2                   2.180E+21    -2.85  30755.0 !
Bozzelli and Dean 1993 10 bar
ac3h5+o2=ch2hco+ch2o                 7.140E+15    -1.21  21046.0 !
Bozzelli and Dean 1993 10 bar

!****************
! sc3h5 reactions
!****************

sc3h5=pc3h4+h                        5.620E+12     0.00  43500.0 !
(86Nar/NIE2/4)
sc3h5+o2=ch3hco+hco                  4.335E+12     0.00      0.0 !
(SLAGLE 88)
sc3h5+ho2=>ch2co+ch3+oh              4.500E+12     0.00      0.0 !
(=ac3h4/WALKER 90)
sc3h5+h=ac3h4+h2                     3.333E+12     0.00      0.0 !
(DAGAUT 90)
!sc3h5+h=pc3h4+h2                     3.333E+12     0.00      0.0 !
(DAGAUT 90)
sc3h5+h=pc3h4+h2                     4.000E+13     0.00      0.0 !

sc3h5+o=>ch2co+ch3                   1.807E+14     0.00      0.0 !
(DAGAUT 90)
sc3h5+ch3=ac3h4+ch4                  1.000E+11     0.00      0.0 !
(DAGAUT 88)
sc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                1.000E+11     0.00      0.0 !
(DAGAUT 90)
sc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                1.000E+11     0.00      0.0 !
(DAGAUT 90)


!****************
! tc3h5 reactions
```

```
!****************

tc3h5=ac3h5                          2.500E+12     0.00   47000.0 !
(86OND/ZIE/8)
tc3h5+o2=ch3co+ch2o                  5.010E+12     0.00   19000.0 !
(=ac3h5+o2/89WAL)
tc3h5+o=>ch2co+ch3                   1.807E+14     0.00       0.0 !
(DAGAUT92 )
tc3h5+h=pc3h4+h2                     1.000E+13     0.00       0.0 !
(ESTImEE)
tc3h5+ch3=ac3h4+ch4                  1.000E+11     0.00       0.0 !
(DAGAUT 90)
tc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                1.000E+11     0.00       0.0 !
(DAGAUT 90)
tc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                1.000E+11     0.00       0.0 !
(DAGAUT 90)

!****************
! ac3h4 reactions
!****************

ac3h4+m=c3h3+h+m                     2.000E+18     0.00   80000.0 !
(hIDAKA 89)
h2o/16.25/co/1.875/co2/3.75/ch4/16.25/c2h6/16.25/

ac3h4=pc3h4                     3.100E+65  -15.1  93814.0  !
(KAKUmOTO,10BAR*2)
DUPLICATE
ac3h4=pc3h4                          1.202E+15     0.00   92400.0 !
(DAGAUT92)
DUPLICATE

ac3h4+o2=c3h3+ho2                    4.000E+13     0.00   61500.0 !
(DAGAUT89)
!ac3h4+ho2=>c3h4o2h                   1.500E+11     0.00    8000.0 !
(=c2h4+ho2*bak)
ac3h4+ho2=>c3h4o2h                   3.000E+11     0.00    8000.0 !
ac3h4+ho2=c3h3+h2o2                  1.800E+13     0.00   19000.0 !
(ESTImEE)
ac3h4+ho2=>ch2co+ch2+oh              5.000E+11     0.00   19000.0 !
(90DAG/CAT)
ac3h4+ho2=>acrol+oh                  5.000E+11     0.00   19000.0 !
(90DAG/CAT)
ac3h4+ho2=>c2h2+ch2o+oh              5.000E+11     0.00   19000.0 !
(90DAG/CAT)
!ac3h4+oh=c3h3+h2o                    2.150E+12     0.00    -200.0 !
(88LIU/mUL*RTI*6.7-2.8)
ac3h4+oh=c3h3+h2o                    3.620E+12     0.00    4170.0 !
ac3h4+oh=ch2co+ch3                   1.000E+12     0.00    -393.0 !
(90DAG/CAT/3)
ac3h4+oh=hco+c2h4                    1.250E+11     0.00    -393.0 !
(90DAG/CAT/2)
ac3h4+oh=c2h5+co                     1.875E+11     0.00    -393.0 !
(90DAG/CAT)
ac3h4+oh=acrol+h                     3.750E+11     0.00    -393.0 !
(90DAG/CAT*bak)
ac3h4+o=c2h4+co                      1.125E-02     4.613  -4243.0 !
(DAGAUT90*1.5)
ac3h4+o=c2h3+hco                     0.500E-03     4.613  -4243.0 !
(DAGAUT90)
ac3h4+o=ch2co+ch2                    1.000E-03     4.613  -4243.0 !
(DAGAUT90)
ac3h4+o=c2h2+ch2o                    2.500E-03     4.613  -4243.0 !
(DAGAUT90)
```

```
ac3h4+h=ac3h5                        1.200E+12     0.00    2700.0 !
(WAGNER 72/3)
ac3h4+h=sc3h5                        8.000E+11     0.00    2000.0 !
(ESTImEE)
ac3h4+h=tc3h5                        8.500E+12     0.00    2000.0 !
(WAGNER 72)
ac3h4+h=c3h3+h2                      1.000E+14     0.00   15009.0 !
(EST=c2h4)
ac3h4+ch3=c3h3+ch4                   1.333E+12     0.00    7700.0 !
(WU 87/1.5)
ac3h4+ac3h5=c3h3+c3h6                9.000E+11     0.00    7700.0 !
(EST/ac3h4+ch3/2)

!*******************
! c3h4o2h reactions
!*******************

c3h4o2h=>ac3h4+ho2                   3.160E+11     0.00   19500.0 !
(=c2h4o2h/2)
c3h4o2h=>c3h4o+oh                    3.160E+11     0.00   19500.0 !
(=c2h4o2h/2)

!***************
!c3h4o reactions
!***************

c3h4o=>acrol                         2.450E+14     0.00   58485.0 !
(77FLO/mETOXIRAN)
c3h4o+o2=>c3h3o+ho2                  4.000E+13     0.00   61500.0 !
(=OXIRAN)
c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh             1.000E+12     0.00   14340.0 !
(=c4h8+ho2)
c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2                4.000E+12     0.00   17000.0 !
(=OXIRAN)
c3h4o+oh=>c3h3o+h2o                  4.790E+13     0.00    5955.0 !
(=OXIRAN)
c3h4o+h=>c3h3o+h2                    2.000E+13     0.00    8300.0 !
(=OXIRAN)

!****************
! c3h3o reactions
!****************

c3h3o=>c2h3co                        8.510E+14     0.00   14000.0 !
(=c2h3o)
c3h3o+o2=>hcco+hco+oh                5.010E+12     0.00   19192.0 !
(=ac3h5+o2)

!****************
! pc3h4 reactions
!****************

!pc3h4+m=c3h3+h+m                     4.700E+18     0.00   80000.0 !
(89hID/NAK2)
pc3h4+m=c3h3+h+m                     3.390E+22    -2.00   92370.0 !
h2o/16.25/co/1.875/co2/3.75/ch4/16.25/c2h6/16.25/h2/2.50/
pc3h4=c2h+ch3                        4.200E+16     0.00  100000.0 !
(WU/KERN87)
pc3h4+o2=c3h3+ho2                    2.500E+12     0.00   51000.0 !
(DAGAUT89)
pc3h4+o2=>hcco+oh+ch2                1.000E+07     1.50   30100.0 !
(DAGAUT 89)
pc3h4+ho2=>c2h4+co+oh                6.090E+09     0.00    7948.0 !
(09/05/94=c2h2)
```

```
pc3h4+ho2=ch3co+ch2o                    3.000E+12    0.00   16000.0 !
(ESTImEE)
pc3h4+ho2=ch3hco+hco                    4.500E+12    0.00   16000.0 !
(ESTImEE)
pc3h4+ho2=c3h3+h2o2                     5.000E+11    0.00   19000.0 !
(ESTImEE)
pc3h4+oh=c3h3+h2o                       6.500E+02    3.00     200.0 !
(DAGAUT 90/2)
pc3h4+oh=ch2co+ch3                      2.000E-04    4.50   -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+oh=hco+c2h4                       1.000E-04    4.50   -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+oh=ch2o+c2h3                      1.000E-04    4.50   -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+oh=acrol+h                        1.000E-04    4.50   -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=ch2co+ch2                       6.400E+12    0.00    2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=c2h3+hco                        3.200E+12    0.00    2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=hcco+ch3                        9.180E+12    0.00    2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=ch2o+c2h2                       3.200E+11    0.00    2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=>hcco+ch2+h                     3.200E+11    0.00    2010.0 !
(KANOFSKY 74/10)
pc3h4+h=tc3h5                           1.300E+13    0.00    1999.0 !
(72WAG/ZEL2*2)
pc3h4+h=c3h3+h2                         2.000E+14    0.00   15000.0 !
(KIEFFER97*RTI*0.1-1.6)
pc3h4+ch3=c3h3+ch4                      4.000E+11    0.00    7700.0 !
(WU 87/5)
pc3h4+c2h3=c3h3+c2h4                    1.000E+11    0.00    7700.0 !
(DAGAUT 89/10)
pc3h4+c2h=c3h3+c2h2                     4.200E+16    0.00  100000.0 !
(WU/KERN87)

!*****************
! c3h4oh reactions
!*****************

pc3h4+oh(+m)=>c3h4oh(+m)                2.290E+13    0.00    1808.0 !
idem c2h2/FULLE: BER.BUNSENGES.P.C. 101, 1433 (1997)
                                 LOW / 7.444E+26   -3.10    1808.0 /
                                 TROE/ 0.17 180.0  50000.0 12772.0 /

c3h4oh=>ch2co+ch3                       3.000E+15    0.00   28000.0 !
(=c2h2oh+m)
c3h4oh=>hco+c2h4                        5.000E+14    0.00   28000.0 !
(=c2h2oh+m)
c3h4oh=>ch2o+c2h3                       1.000E+15    0.00   28000.0 !
(=c2h2oh+m)
c3h4oh=>acrol+h                         5.000E+14    0.00   28000.0 !
(=c2h2oh+m)

!***************
! c3h3 reactions
!***************

c3h3+o2=ch2co+hco                       3.010E+10    0.00    2870.0 !
(GUTmAN 86)
c3h3+ho2=c3h2+h2o2                      2.000E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
c3h3+oh=c3h2+h2o                        5.000E+12    0.00       0.0 !
```

```
(DAGAUT 90)
c3h3+oh=hcco+ch3                        5.000E+12    0.00       0.0 !
(DAGAUT 90)
c3h3+o=>c2h2+hco                        1.385E+14    0.00       0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+o=c2h3+co                          4.615E+13    0.00       0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+o=c2h+ch2o                         4.615E+13    0.00       0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+o=>c2h2+co+h                       4.615E+13    0.00       0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+h=c3h2+h2                          5.000E+13    0.00    3000.0 !
(mILLER 92)
c3h3+ch=ic4h3+h                         7.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c3h3+ch=nc4h3+h                         7.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c3h3+ch2=c4h4+h                         4.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c3h3+ch3=c4h6                           3.330E+12    0.00       0.0 !
(87WU/KERN/1.5)

c3h3+c2h3=c5h5+h                  9.63E+40 -7.8   28820.0   ! MarinoV
1996

!***************
! c3h2 reactions
!***************

ch+c2h2=c3h2+h                          1.000E+14    0.00       0.0 !
(mILLER 89)
c3h2+o2=hcco+hco                        3.000E+10    0.00    2870.0 !
(=c3h3 )
c3h2+oh=c2h2+hco                        5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c3h2+ch2=ic4h3+h                        3.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)

!****************
! c3h5o reactions
!****************

!c3h5o=acrol+h                          1.000E+14    0.00   19000.0 !
(89WIL/CER     )

c3h5o=acrol+h      1.000E+14  0.00  29100.0
rev / 7.714E+11  0.48  17750.0 /
c3h5o=c2h3+ch2o  2.028E+12  0.09  23560.0 ! Curran
rev / 1.500E+11  0.00  10600.0/
c3h5o+o2=acrol+ho2  1.000E+12  0.00  6000.0
rev / 1.288E+11  0.00  32000.0 /


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! propanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

ethco+h=h2+c2h5co                       4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5327
ethco+oh=h2o+c2h5co                     4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5328
```

```
ethco+ho2=h2o2+c2h5co                   1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5329
ethco+ch3=ch4+c2h5co                    2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5330
ethco+c2h5=c2h6+c2h5co                  1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5331
ethco+o2=c2h5co+ho2                     1.005E+13    0.00   40700.0 !
Curran

c2h5co+M=co+c2h5+M                      8.640E+15    0.00   14400.0 !

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! acroleine REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

acrol+h=h2+c2h3co                       4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5332
acrol+oh=h2o+c2h3co                     4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5333
acrol+ho2=h2o2+c2h3co                   1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5334
acrol+ch3=ch4+c2h3co                    2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5335
acrol+c2h5=c2h6+c2h3co                  1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5336

acrol=c2h3+hco                          2.450E+16    0.00   84128.0 !
acrol+o=c2h3co+oh                       5.010E+12    0.00    1790.0 !
acrol+c2h3=c2h4+c2h3co                  1.740E+12    0.00    8440.0 !
acrol+ac3h5=c3h6+c2h3co                 1.000E+12    0.00    8000.0 !

c2h3co+m=>c2h3+co+m                     8.600E+15    0.00   23000.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/
!c2h3co+ho2=c2h3+co2+oh                  2.000E+13    0.00       0.0

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! acetone REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

aceton+h=h2+ch2coch3                    2.700E+07    2.00    5000.0  !
FCO 5396
aceton+oh=h2o+ch2coch3                  7.800E+06    2.00    -765.0  !
FCO 5397
aceton+ho2=h2o2+ch2coch3                1.200E+12    0.00   15500.0  !
FCO 5398
aceton+ch3=ch4+ch2coch3                 6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5399
aceton+ch3o2=ch3o2h+ch2coch3            6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5400
aceton+c2h5=c2h6+ch2coch3               6.000E+11    0.00   11000.0  !
FCO 5401

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ch2coch3 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

ch2coch3=ch2co+ch3                      1.000E+15    0.00   31000.0 !
```

```
Curran
ch3coch2o2=ch2coch3+o2                  9.300E+13   -1.11   27450.0 !
Curran
                                 rev /  1.200E+11    0.00   -1100.0 /
aceton+ch3coch2o2=ch2coch3+ch3coch2o2h  1.000E+11    0.00    5000.0 !
Curran
                                 rev /  1.995E+10    0.00   10000.0 /
ch2o+ch3coch2o2=hco+ch3coch2o2h         1.288E+11    0.00    9000.0 !
Curran
                                 rev /  2.512E+10    0.00   10100.0 /
ho2+ch3coch2o2=ch3coch2o2h+o2           1.000E+12    0.00       0.0 !
Curran
!                                rev /  0.000E+00    0.00       0.0 /
ch3coch2o2h=ch3coch2o+oh                1.000E+16    0.00   43000.0 !
Curran
                                 rev /  2.038E+09    1.55   -4375.0 /
ch3coch2o=ch3co+ch2o                    8.711E+16   -1.18   13760.0 !
Curran
                                 rev /  1.000E+11    0.00   11900.0 /

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ch2ch2hco REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

c2h4+hco=ch2ch2hco                      2.110E+11    0.00    7350.0 !
ch2ch2hco+o2=o2c2h4hco                  9.000E+18   -2.50       0.0 !
o2c2h4hco+ho2=>ho2c2h4hco+o2         2.290e+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
o2c2h4hco=ho2c2h4co                     5.340E+05    1.89   20273.5 !
ho2c2h4co=co+c2h4o2h                    2.000E+13    0.00   28700.0 !
Curran c2h5co=c2h5+co
ho2c2h4hco=>oc2h4hco+oh                     1.500e+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
ch2o+ch2hco=oc2h4hco                        1.500e+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ch3cocho REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

ch3cocho+oh=ch3coco+h2o                 2.300E+10    0.73  -1100.0 !
idem ch3hco+oh
ch3cocho+h=ch3coco+h2                   4.100E+09    1.16    2405.0 !
idem ch3hco+h
ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2               3.000E+12    0.0    12000.0 !
idem ch3hco+ho2

ch3coco=ch3co+co                        1.400E+14    0.00    6692.0 !
ch3coco+o2=co2+co2+ch3                  3.000E+10    0.00    2870.0
ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co                2.000E+13    0.00       0.0

ch2co+hco=ch2cohco                      2.000E+11    0.00    7800.0 !
addition de c=o sur c de c=c
                                                                       !
analogy with c3h6+ch3co=c3h6coch3-2
                                                                       !
Curran, h. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K.
                                                                       !
Combustion and Flame 129:253-280 (2002).
```

```
!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! hcoch2hco REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

hcoch2hco+oh=hcoch2co+h2o              4.600E+10    0.73  -1100.0 !
idem ch3hco+oh *2
hcoch2hco+h=hcoch2co+h2                8.200E+09    1.16   2405.0 !
idem ch3hco+h *2
hcoch2hco+ho2=hcoch2co+h2o2            6.000E+12    0.0   12000.0 !
idem ch3hco+ho2 *2
hcoch2hco+ch3=hcoch2co+ch4             1.520E+01    3.4    3740.0 !
idem ch3hco+ch3 *2
hcoch2hco+o2=hcoch2co+ho2              6.000E+13    0.0   39200.0 !
idem ch3hco+o2 *2
hcoch2co=ch2hco+co                     1.834E+15   -0.73  12910.0 !
idem c2h5co= Curran


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€        SOUS-mECANISmE C4
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! n-BUTANE
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

c4h10=c2h5+c2h5                        2.000E+16    0.00   81300.0 !
Ristori
c4h10=ch3+nc3h7                        1.000E+17    0.00   85400.0 !
Ristori

c4h10=pc4h9+h                          1.580E+16    0.00   98000.0 !
Ristori
c4h10=sc4h9+h                          1.000E+16    0.00   95000.0 !
Ristori

c4h10+o2=pc4h9+ho2                     2.512E+13    0.00   49000.0 !
WESTB.86
c4h10+h=pc4h9+h2                       5.630E+07    2.00    7700.0 !
PITZ 91
c4h10+o=pc4h9+oh                       4.890E+06    2.40    5505.0 !
COhEN.86
c4h10+oh=pc4h9+h2o                     4.140E+07    1.73     753.0 !
TULLY 86
c4h10+ho2=pc4h9+h2o2                   1.700E+13    0.00   20460.0 !
PITZ 88
c4h10+ch3=pc4h9+ch4                    2.189E+11    0.00   11400.0 !
PITZ  88
c4h10+c2h3=pc4h9+c2h4                  1.000E+12    0.00   18000.0 !
WESTB.86
c4h10+c2h5=pc4h9+c2h6                  1.000E+11    0.00   13400.0 !
WESTB.86
```

```
c4h10+ac3h5=pc4h9+c3h6                 7.943E+11    0.00   20500.0 !
WESTB.86
c4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh                 3.000E+11    0.00    7000.0 !
PITZ  88

c4h10+o2=sc4h9+ho2                     3.981E+13    0.00   47600.0 !
WESTB.86
c4h10+h=sc4h9+h2                       4.777E+06    2.50    7369.0 !
FIT 8/8/93
c4h10+o=sc4h9+oh                       4.280E+05    2.60    2583.0 !
COhEN 86
c4h10+oh=sc4h9+h2o                     7.234E+07    1.64    -246.0 !
TULLY 86
c4h10+ho2=sc4h9+h2o2                   4.000E+12    0.00   18150.0 !
PITZ 88
c4h10+ch3=sc4h9+ch4                    2.189E+11    0.00    9600.0 !
PITZ  88
c4h10+c2h3=sc4h9+c2h4                  7.943E+11    0.00   16800.0 !
WESTB.86
c4h10+c2h5=sc4h9+c2h6                  1.000E+11    0.00   10400.0 !
WESTB.86
c4h10+ac3h5=sc4h9+c3h6                 3.162E+11    0.00   16400.0 !
WESTB.86
c4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh                 6.000E+11    0.00    7000.0 !
PITZ  88

c4h10+o2cho=pc4h9+ho2cho               1.680E+13    0.00   20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
c4h10+o2cho=sc4h9+ho2cho               1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h9 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

!**************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!**************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!pc4h9=c2h5+c2h4                        2.500E+12    0.00   28500.0 !
(RTI 28/06/2000)
pc4h9=c2h5+c2h4                        2.500E+13    0.00   28824.0 !
Bikas
sc4h9=ch3+c3h6                         2.000E+13    0.00   31000.0  !
DE 2404 CN

pc4h9=c3h6+ch3                         1.260E+12    0.00   27026.0 !
Kerr Trotman

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
pc4h9=c4h8+h                           1.260E+13    0.00   38600.0 !
(PITZ 86)
sc4h9=t2c4h8+h                         4.570E+12    0.00   34000.0 !
(85TSA)
sc4h9=c2c4h8+h                         4.170E+12    0.00   34780.0 !
(85TSA)


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!pc4h9+o2=c4h8+ho2                      3.800E+10    0.00   -2000.0 !
(PITZ 88 )
pc4h9+o2=c4h8+ho2                      1.900E+12    0.00    5000.0 !
sc4h9+o2=c4h8+ho2                      7.590E+09    0.00   -2000.0 !
(PITZ 88)
sc4h9+o2=t2c4h8+ho2                    9.000E+09    0.00   -2000.0 !
(PITZ 88)
sc4h9+o2=c2c4h8+ho2                    9.000E+09    0.00   -2000.0 !
(PITZ 88)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

pc4h9=sc4h9                            1.390E+09    0.98   33760.0 !
(WB98)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) h abstraction
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

pc4h9+ho2=c4h8+h2o2                    2.410E+13    0.00       0.0 !
(=nc3h7/TSA88)
pc4h9+oh=c4h8+h2o                      2.400E+13    0.00       0.0 !
(=nc3h7/TSANG88)
pc4h9+h=c4h8+h2                        1.250E+13    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
pc4h9+ch3=c4h8+ch4                     2.000E+12    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
pc4h9+c2h5=c4h8+c2h6                   1.600E+12    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
pc4h9+ac3h5=c4h8+c3h6                  1.000E+12    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)

sc4h9+ho2=c4h8+h2o2                    2.400E+13    0.00       0.0 !
(=ic3h7/TSANG88)
sc4h9+ho2=t2c4h8+h2o2                  2.400E+13    0.00       0.0 !
(=ic3h7/TSANG88)
sc4h9+ho2=c2c4h8+h2o2                  2.400E+13    0.00       0.0 !
(=ic3h7/TSANG88)
sc4h9+oh=c4h8+h2o                      2.400E+13    0.00       0.0 !
(=ic3h7/TSANG88)
sc4h9+oh=t2c4h8+h2o                    2.400E+13    0.00       0.0 !
(=nc3h7/TSANG88)
sc4h9+oh=c2c4h8+h2o                    2.400E+13    0.00       0.0 !
(=nc3h7/TSANG88)
sc4h9+h=c4h8+h2                        3.333E+13    0.00       0.0 !
(ALLARA 80/1.5)
sc4h9+h=t2c4h8+h2                      5.000E+13    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
sc4h9+h=c2c4h8+h2                      5.000E+13    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
```

```
sc4h9+ch3=c4h8+ch4                     8.000E+11    0.00       0.0 !
(ALLARA 80/1.25)
sc4h9+ch3=t2c4h8+ch4                   1.000E+12    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
sc4h9+ch3=c2c4h8+ch4                   1.000E+12    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!pc4h9+o2=c4h9qjA                       4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!sc4h9+o2=c4h9qjB                       1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

pc4h9+o2=c4h9qjA                       9.000E+18   -2.50       0.0 !
sc4h9+o2=c4h9qjB                       1.700E+19   -2.50       0.0 !

!#################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h9qj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#################

!**************************
! 1) isomerisation to QOOh
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!**************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h9qjA=c4h8rBqA                       3.300E+09    1.00   32500.0  !
IS 249 KB
c4h9qjA=c4h8rCqA                       5.700E+08    1.00   25000.0  !
IS 250 KB
c4h9qjA=c4h8rDqA                       1.500E+08    1.00   25000.0  !
IS 251 KB

c4h9qjB=c4h8rDqB                       8.600E+08    1.00   28000.0  !
IS 652 KB
c4h9qjB=c4h8rAqB                       5.000E+09    1.00   35500.0  !
IS 656 KB
c4h9qjB=c4h8rCqB                       3.300E+09    1.00   32500.0  !
IS 685 KB

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h9qjA+ho2=nc4h9o2h+o2                2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c4h9qjB+ho2=nc4h9o2h+o2                2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran


!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h8rXqjY REACTIONS
```

```
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!######################

!***************************
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
!***************************

c4h8rDqA=c2h4+c2h4o2h                  2.000E+13    0.00   28700.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation
! c5h10rYqX=c5h10rZqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8rDqA=c4h8rAqA                      5.700E+08    1.00   15300.0  !
IS 309 KB
c4h8rDqB=c4h8rAqB                      8.600E+08    1.00   19800.0  !
IS 653 KB

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c5h10rYqX+o2=c5h10qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c4h8rAqA+o2=c4h8qjAqA                  1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c4h8rBqA+o2=c4h8qjBqA                  1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c4h8rCqA+o2=c4h8qjCqA                  1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c4h8rDqA+o2=c4h8qjDqA                  4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

!c4h8rAqB+o2=c4h8qjAqB                  4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!c4h8rCqB+o2=c4h8qjCqB                  1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c4h8rDqB+o2=c4h8qjDqB                  4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

c4h8rAqA+o2=c4h8qjAqA                  9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c4h8rBqA+o2=c4h8qjBqA                  1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c4h8rCqA+o2=c4h8qjCqA                  1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c4h8rDqA+o2=c4h8qjDqA                  9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c4h8rAqB+o2=c4h8qjAqB                  1.500E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
c4h8rCqB+o2=c4h8qjCqB                  1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c4h8rDqB+o2=c4h8qjDqB                  9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8rCqA=>oh+ch2o+c3h6                 5.000E+13    0.00   25500.0  !
c4h8rDqB=>oh+ch3hco+c2h4               5.000E+13    0.00   25500.0  !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) o-o breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8rAqA=oh+nc3h7hco                   1.000E+09    0.00    7500.0  !
DE 1964 CW


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
!   (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8rBqA=oh+c4h8o#3                    6.100E+11    0.00   17950.0
! OR 2442 CR
c4h8rCqA=oh+c4h8o#4                    9.200E+10    0.00   16600.0
! OR 2443 CR
c4h8rDqA=oh+c4h8o#5                    2.100E+08    0.00    6500.0
! OR 2444 CR

c4h8rAqB=oh+c4h8o#3                    6.100E+11    0.00   17950.0
! OR 2560 CR
c4h8rCqB=oh+c4h8o#3                    6.100E+11    0.00   17950.0
! OR 2568 CR
c4h8rDqB=oh+c4h8o#4                    9.200E+10    0.00   16600.0
! OR 2559 CR


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
!   alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8rBqA=ho2+c4h8                      8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 1768 CR
c4h8rAqB=ho2+c4h8                      8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2275 CR
c4h8rCqB=ho2+c4h8                      8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2400 CR


!######################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h8qjXqY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!######################

!***************************
! ketohydroperoxides formation
!***************************

c4h8qjBqA=oh+c4h7oAqB                  3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
c4h8qjCqA=oh+c4h7oAqC                  5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
```

```
c4h8qjDqA=oh+c4h7oAqD                  9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

c4h8qjAqB=oh+c4h7oBqA                  1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
c4h8qjCqB=oh+c4h7oBqC                  1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
c4h8qjDqB=oh+c4h7oBqD                  2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol


!##########################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! nc4h9o2h, c4h7o2h REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##########################################

!***************************
! hydroperoxydes decomposition
!***************************

nc4h9o2h=>oh+ch3hco+c2h5               1.500E+16    0.00   42000.0  !
DKh 4879


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h7oq REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!*********************************
! Ketohydroperoxide decomposition
!*********************************

!c4h7oAqB=>oh+hco+ethco                 1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c4h7oAqC=>oh+ch2hco+ch3hco             1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c4h7oAqD=>oh+ch2o+ch2ch2hco            1.000E+16    0.00   43000.0
!

!c4h7oBqA=>oh+ch2o+c2h5co               1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c4h7oBqC=>oh+ch3co+ch3hco              1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c4h7oBqD=>oh+ch2o+ch2coch3             1.000E+16    0.00   43000.0
!

c4h7oAqB=>oh+hco+ethco                 7.500E+15    0.00   44500.0 !
c4h7oAqC=>oh+ch2hco+ch3hco             7.500E+15    0.00   44500.0 !
c4h7oAqD=>oh+ch2o+ch2ch2hco            7.500E+15    0.00   44500.0 !

c4h7oBqA=>oh+ch2o+c2h5co               7.500E+15    0.00   44500.0 !
c4h7oBqC=>oh+ch3co+ch3hco              7.500E+15    0.00   44500.0 !
c4h7oBqD=>oh+ch2o+ch2coch3             7.500E+15    0.00   44500.0 !


!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h8o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################
```

```
!*******************************
! O-ring decomposition
!*******************************

c4h8o#3+h=>h2+ch2co+c2h5               2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 4953
c4h8o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5             7.800E+06    2.00    -765.0  !
DOR 4954
c4h8o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5           1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 4955
c4h8o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5            6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 4956
c4h8o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5       6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 4957
c4h8o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5          6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 4958
c4h8o#3+o=>oh+ch2hco+c2h4              7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5105

c4h8o#4+h=>h2+ch3chch2hco              2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 5001
c4h8o#4+h=>h2+ch3coc2h4p                2.700E+07    2.00    5000.0
! DOR 5001
c4h8o#4+oh=>h2o+ch3chch2hco            7.800E+06    2.00    -765.0  !
DOR 5002
c4h8o#4+oh=>h2o+ch3coc2h4p              7.800E+06    2.00    -765.0
! DOR 5002
c4h8o#4+ho2=>h2o2+ch3chch2hco          1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 5003
c4h8o#4+ho2=>h2o2+ch3coc2h4p            1.200E+12    0.00   15500.0
! DOR 5003
c4h8o#4+ch3=>ch4+ch3chch2hco           6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 5004
c4h8o#4+ch3=>ch4+ch3coc2h4p             6.000E+11    0.00    9600.0
! DOR 5004
c4h8o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch3chch2hco      4.500E+12    0.00   17500.0  !
DOR 5005
c4h8o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch3coc2h4p        4.500E+12    0.00   17500.0
! DOR 5005
c4h8o#4+c2h5=>c2h6+ch3chch2hco         6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 5006
c4h8o#4+c2h5=>c2h6+ch3coc2h4p           6.000E+11    0.00   11000.0
! DOR 5006
c4h8o#4+o=>oh+ch3chch2hco              7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5106
c4h8o#4+o=>oh+ch3coc2h4p                7.800E+13    0.00    5200.0
! DOR 5106

c4h8o#5+h=h2+c3h6cho-1             2.700E+07    2.00    5000.0  ! DOR
5007
c4h8o#5+oh=h2o+c3h6cho-1           7.800E+06    2.00    -765.0  ! DOR
5008
c4h8o#5+ho2=h2o2+c3h6cho-1         1.200E+12    0.00   15500.0  ! DOR
5009
c4h8o#5+ch3=ch4+c3h6cho-1          6.000E+11    0.00    9600.0  ! DOR
5010
c4h8o#5+ch3o2=ch3o2h+c3h6cho-1     4.500E+12    0.00   17500.0  ! DOR
5011
c4h8o#5+c2h5=c2h6+c3h6cho-1        6.000E+11    0.00   11000.0  ! DOR
5012
c4h8o#5+o=oh+c3h6cho-1             7.800E+13    0.00    5200.0  ! DOR
5107
```

```
!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h8 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

!*********************************
! 1) addition of h and Ch3
! 2) addition of Oh
! 3) addition of O
! 4) addition of ho2
! 5) decomposition by R
! 6) isomerisation
! 7) C-C breaking
! 8) C-h breaking
!*********************************

c2c4h8=c4h6+h2                          1.000E+13    0.00   65500.0 !
(76RIC/mAR)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) addition of h and Ch3
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

sc4h9=c4h8+h                            2.000E+13    0.00   40400.0 !
Nicolle

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition of Oh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c4h8+oh=ch2o+nc3h7                      3.440E+12    0.00    -928.0 !
(89ATK*RTI*1.72)
!c4h8+oh=ch3hco+c2h5                     4.000E+11    0.00    -928.0 !
(89ATK*RTI/1.7)
!c4h8+oh=c2h6+ch3co                      1.000E+10    0.00       0.0 !
Nicolle

c4h8+oh=ch2o+nc3h7                      1.000E+12    0.00       0.0 !
Curran
c4h8+oh=ch3hco+c2h5                     1.000E+12    0.00       0.0 !
Curran
c4h8+oh=ethco+ch3                       1.000E+12    0.00       0.0 !
Curran
c4h8+oh=ch3co+c2h6                      5.000E+11    0.00       0.0 !
Curran
c4h8+oh=c2h5co+ch4                      5.000E+11    0.00       0.0 !
Curran

t2c4h8+oh=ch3hco+c2h5                   2.600E+13    0.00       0.0 !
Curran
c2c4h8+oh=ch3hco+c2h5                   2.600E+13    0.00       0.0 !
Curran

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) addition of O
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8+o=c3h6+ch2o                        7.230E+05    2.34   -1050.0 !
(PITZ 86)
c4h8+o=ch3hco+c2h4                      1.300E+13    0.00     850.0 !
(PITZ 86)
c4h8+o=c2h5+ch3co                       1.625E+13    0.00     850.0 !
(PITZ 84)
```

```
c2c4h8+o=ic3h7+hco                      6.030E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
c2c4h8+o=ch3hco+c2h4                    1.000E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)

t2c4h8+o=ic3h7+hco                      6.030E+12    0.00       0.0 !
(PITZ86)
t2c4h8+o=ch3hco+c2h4                    1.000E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) addition of ho2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8+ho2=>ch2o+c3h6+oh                  2.500E+12    0.00   14340.0 !
(89WAL*2.5)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) decomposition by R
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8+o2=Cc4h7-1+ho2                     4.000E+12    0.00   40000.0 !
(WALKER 77EST*RTI*1.8-2.2)
!c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2                   1.000E+11    0.00   17060.0 !
(WALKER 77)
c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2                   6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o                     4.186E+06    2.00    -543.0 !
(89ATK/1.5)
c4h8+o=Cc4h7-1+oh                       2.600E+12    0.00    4500.0 !
(WALKER 77)
c4h8+h=Cc4h7-1+h2                       1.950E+13    0.00    4445.0 !
(LOSER 89*3)
c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4                    1.000E+11    0.00    7300.0 !
(ALLARA 80)
c4h8+c2h5=Cc4h7-1+c2h6                  1.000E+11    0.00    8300.0 !
(ALLARA 80)
c4h8+ac3h5=Cc4h7-1+c3h6                 8.000E+10    0.00   12400.0 !
(ALLARA 80)
c4h8+sc3h5=Cc4h7-1+c3h6                 8.000E+10    0.00   12400.0 !
(ALLARA 80)
c4h8+tc3h5=Cc4h7-1+c3h6                 8.000E+10    0.00   12400.0 !
(ALLARA 80)

c4h8+o2=Dc4h7-1+ho2                     1.256E+13    0.00   49000.0 !
idem c4h10->pc4h9 /2
c4h8+h=Dc4h7-1+h2                       2.815E+07    2.00    7700.0 !
idem c4h10->pc4h9 /2
c4h8+o=Dc4h7-1+oh                       2.440E+06    2.40    5505.0 !
idem c4h10->pc4h9 /2
c4h8+oh=Dc4h7-1+h2o                     2.070E+07    1.73     753.0 !
idem c4h10->pc4h9 /2
c4h8+ho2=Dc4h7-1+h2o2                   8.500E+12    0.00   20460.0 !
idem c4h10->pc4h9 /2
c4h8+ch3=Dc4h7-1+ch4                    1.000E+11    0.00    7300.0 !
(ALLARA 80)
c4h8+c2h5=Dc4h7-1+c2h6                  5.000E+10    0.00   13400.0 !
idem c4h10->pc4h9 /2
c4h8+ch3o=Dc4h7-1+ch3oh                 1.500E+11    0.00    7000.0 !
idem c4h10->pc4h9 /2

c2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o                   9.000E+06    2.00     -60.0 !
(89ATK)
```

```
c2c4h8+h=Cc4h7-1+h2                     1.000E+13    0.00    3500.0 !
(SUNDARAm 78)
c2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4                  1.000E+11    0.00    8200.0 !
(SUNDARAm 78)

t2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o                   9.000E+06    2.00     -60.0 !
(89ATK)
t2c4h8+h=Cc4h7-1+h2                     5.000E+12    0.00    3500.0 !
(ALLARA 80)
t2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4                  1.000E+11    0.00    8200.0 !
(SUNDARAm 78)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8=c2c4h8                             4.000E+11    0.00   60000.0 !
(DENTE 83/5.5)
c4h8=t2c4h8                             4.000E+11    0.00   60000.0 !
(DENTE 83/5.5)
c2c4h8=t2c4h8                           3.620E+13    0.00   61330.0 !
(FITNIST 02/00)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 7) C-C breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8=ac3h5+ch3                          1.500E+19   -1.00   73400.0 !
(PITZ 88)
c4h8=c2h3+c2h5                          1.000E+19   -1.00   96770.0 !
(PITZ 88)
c2c4h8=sc3h5+ch3                        2.000E+16    0.00   71300.0 !
(SChARFE 85)
t2c4h8=sc3h5+ch3                        2.000E+16    0.00   71300.0 !
(SChARFE 85)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 8) C-h breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c4h8=Cc4h7-1+h                          4.078E+18   -1.00   97350.0 !
(PITZ 86)
c2c4h8=Cc4h7-1+h                        4.074E+18   -1.00   97350.0 !
(PITZ 86)
t2c4h8=Cc4h7-1+h                        4.074E+18   -1.00   97350.0 !
(PITZ 86)


!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! Dc4h7-1 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

Dc4h7-1=c2h4+c2h3                       5.000E+13    0.00   38000.0 !
(85SChARFE)
Dc4h7-1=c4h6+h                          1.000E+14    0.00   44000.0 !
(RTI/16-2.2)
Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2                     1.020E+12    0.00   22654.0 !
(08/09/2000DV)
Dc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2                   1.000E+12    0.00       0.0 !
(=ac3h5+h/10)
!Dc4h7-1+ho2=>ac3h5+ch2o+oh              1.000E+12    0.00       0.0 !
```

```
(Cc4h7-1  )
Dc4h7-1+oh=c4h6+h2o                     4.000E+13    0.00       0.0 !
(Cc4h7-1  )
Dc4h7-1+o=c4h6+oh                       4.000E+13    0.00       0.0 !
(Cc4h7-1  )
Dc4h7-1+h=c4h6+h2                       3.160E+13    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Dc4h7-1+ch3=c4h6+ch4                    7.940E+12    0.00       0.0 !
(SChARFE 85)
Dc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Dc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Dc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4                  5.000E+11    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Dc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4                5.000E+11    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Dc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4                5.000E+11    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Dc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h3)
Dc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h3)
Dc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6                 6.300E+12    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
Dc4h7-1+Dc4h7-1=c4h6+c4h8               3.160E+12    0.00       0.0 !
(SChARFE 85)
!Dc4h7-1+h2=c4h8+h                       3.000E+12    0.00   15700.0 !
(85SChARFE)
!Dc4h7-1+c2h6=c4h8+c2h5                  3.000E+13    0.00   12300.0 !
(85SChARFE)
Dc4h7-1+c2h4=c4h8+c2h3                  1.000E+11    0.00   15000.0 !
(85SChARFE)
Dc4h7-1+c3h6=c4h8+ac3h5                 1.000E+11    0.00    9800.0 !
(85SChARFE)
Dc4h7-1+c4h8=c4h8+Cc4h7-1               1.000E+11    0.00    8300.0 !
(85SChARFE)
Dc4h7-1+t2c4h8=c4h8+Cc4h7-1             2.000E+11    0.00    9800.0 !
(85SChARFE)
Dc4h7-1+c2c4h8=c4h8+Cc4h7-1             2.000E+11    0.00    9800.0 !
(85SChARFE)
c4h6+Dc4h7-1=nc4h5+c4h8                 6.320E+02    3.13   20010.0 !
(=Cc4h7-1)
c4h6+Dc4h7-1=ic4h5+c4h8                 6.320E+02    3.13   18010.0 !
(=Cc4h7-1)

Dc4h7-1+ho2=ac3h5+ch2o+oh               1.000E+12    0.00       0.0 !
(Cc4h7-1  )
Dc4h7-1+ch3o2=ac3h5+ch3o+ch2o           1.000E+12    0.00       0.0 !
(Cc4h7-1  )
Dc4h7-1+c2h5o2=ac3h5+c2h5o+ch2o         1.000E+12    0.00       0.0 !
(Cc4h7-1  )
!Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2                     1.000E+12    0.00    5020.0 !

!#######################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!But-1-èn-3-yle radical reactions Cc4h7-1
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#######################################

Cc4h7-1+o2=c4h6+ho2                     1.020E+12    0.00   22654.0 !
Ristori
Cc4h7-1=c4h6+h                          1.200E+14    0.00   49300.0 !
Nicolle
```

```
Cc4h7-1=c2h4+c2h3                       1.000E+14    0.00   49000.0 !
Konnov

Cc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2                   1.000E+12    0.00       0.0 !
(13/6/97)
Cc4h7-1+oh=c4h6+h2o                     4.000E+13    0.00       0.0 !
(21/05/97)
Cc4h7-1+o=c4h6+oh                       4.000E+13    0.00       0.0 !
(21/05/97)
Cc4h7-1+h=c4h6+h2                       3.160E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Cc4h7-1+ch3=c4h6+ch4                    1.000E+13    0.00       0.0 !
(SChARFE 85)
Cc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Cc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Cc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4                  5.000E+11    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Cc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4                5.000E+11    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Cc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4                5.000E+11    0.00       0.0 !
(PITZ 86)
Cc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h3)
Cc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h3)
Cc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6                 6.300E+12    0.00       0.0 !
(ALLARA 80)
Cc4h7-1+ac3h5=c4h8+ac3h4                1.000E+12    0.00       0.0 !
(SChARFE 85)
Cc4h7-1+ac3h5=>mhd                      3.200E+11    0.00       0.0 !
(SChARFE85)
Cc4h7-1+Cc4h7-1=c4h6+c4h8               3.000E+12    0.00       0.0 !
(SChARFE 85)

Cc4h7-1+ho2=>acrol+ch3+oh                  7.000E+12    0.00   -1000.0
! CUrran
Cc4h7-1+ch3o2=>acrol+ch3+ch3o              7.000E+12    0.00   -1000.0
! CUrran
Cc4h7-1+c2h5o2=>acrol+ch3+c2h5o            7.000E+12    0.00   -1000.0
! CUrran

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! butyne reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c3h3+ch3=butyne                         5.000E+12    0.00       0.0 !
(87WU/KERN  )

butyne+ho2=nc4h5+h2o2                   5.000E+11    0.00   17000.0 !
(ESTImEE)
butyne+ho2=ic4h5+h2o2                   5.000E+11    0.00   17000.0 !
(pc3h4)
butyne+oh=nc4h5+h2o                     2.600E+02    3.00     200.0 !
(pc3h4)
butyne+oh=ic4h5+h2o                     2.600E+02    3.00     200.0 !
(pc3h4)
butyne+oh=ch2co+c2h5                    4.000E-04    4.50   -1000.0 !
(pc3h4)
butyne+o=c3h6+co                        2.000E+13    0.00    1660.0 !
```

```
(87CVE)
butyne+h=ac3h4+ch3                      1.300E+05    2.50    1000.0 !
(95hID/hIG)
butyne+h=c2h5+c2h2                      6.500E+04    2.50    1000.0 !
(95hID/hIG)
butyne+h=ic4h5+h2                       6.500E+13    0.00    9400.0 !
(95hID/hIG)
butyne+h=nc4h5+h2                       6.500E+13    0.00    9400.0 !
(95hID/hIG)
butyne+ch3=ic4h5+ch4                    1.000E+14    0.00   19500.0 !
(95hID/hIG)
butyne+ch3=nc4h5+ch4                    1.000E+14    0.00   19500.0 !
(95hID/hIG)
butyn2=c4h6                             3.000E+13    0.00   65000.0 !
(95hID/hIG)
butyn2=meall                            3.000E+13    0.00   67000.0 !
(95hID/hIG)
butyn2+h=pc3h4+ch3                      2.600E+05    2.50    1000.0 !
(95hID/hIG)
butyne=meall                            2.500E+13    0.00   65000.0 !
(95hID/hIG)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! meall methylallene=buta-1,2-diene reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

meall=c4h6                              2.500E+13    0.00   63000.0 !
(95hID/hIG)
meall=c3h3+ch3                          2.000E+15    0.00   75000.0 !
(95hID/hIG)
meall+h=ac3h4+ch3                       6.000E+12    0.00    2100.0 !
(95hID/hIG)
meall+h=pc3h4+ch3                       6.000E+12    0.00    2100.0 !
(95hID/hIG)
meall+oh=ic4h5+h2o               2.00E+07  2.0  1000.0 !  (Q)
meall+h=ic4h5+h2                 5.00E+07  2.0  5000.0 !  (Q)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h6 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

ic3h7+c2h2=c4h6+ch3                     2.770E+10    0.00    6504.0 !
(88TSA)

c4h6=c2h4+c2h2                          1.000E+14    0.00   75000.0 !
(NIST)
c4h6=nc4h5+h                            1.580E+16    0.00  110000.0 !
(85DEA)
c4h6+o2=nc4h5+ho2                       2.800E+13    0.00   62500.0 !
(EST WALKER95)
c4h6+o2=ic4h5+ho2                       1.400E+12    0.00   50600.0 !
(EST WALKER95)
c4h6+ho2=nc4h5+h2o2                     2.000E+11    0.00   12600.0 !
(Est Walker77)
c4h6+ho2=ic4h5+h2o2                     1.000E+11    0.00    9920.0 !
(Est Walker77)
c4h6+oh=nc4h5+h2o                       1.000E+07    2.00    7253.0 !
(88LIU/mUL E>*RTI/2.29)
c4h6+oh=ic4h5+h2o                       8.000E+06    2.00    3744.0 !
(88LIU/mUL E>*RTI/2.17)
```

```
c4h6+o=ic4h5+oh                         4.530E+15   -0.475   7028.0 !
(93ADU/FON-85CVE)
c4h6+o=nc4h5+oh                         2.270E+15   -0.475   7028.0 !
(93ADU/FON-85CVE)
c4h6+h=pc3h4+ch3                        1.300E+03    2.50    1000.0 !
(RTI 26/06/2000/10)
c4h6+h=ac3h4+ch3                        1.000E+13    0.00   15000.0 !
(RTI 21/06/2000)
c4h6+h=nc4h5+h2                         5.000E+15    0.00   22800.0 !
(93hID/hIG)
c4h6+h=ic4h5+h2                         2.500E+15    0.00   22800.0 !
(93hID/hIG)
c4h6+ch3=nc4h5+ch4                      2.000E+14    0.00   24800.0 !
(93hID/hIG E>)
c4h6+ch3=ic4h5+ch4                      4.000E+14    0.00   22800.0 !
(93hID/hIG)
c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4                    6.320E+02    3.13   20010.0 !
(EST 14/4)
c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4                    6.320E+02    3.13   18010.0 !
(EST 14/4)
c4h6+Cc4h7-1=nc4h5+c4h8                 6.320E+02    3.13   20010.0 !
(EST 14/4)
c4h6+Cc4h7-1=ic4h5+c4h8                 6.320E+02    3.13   18010.0 !
(EST 14/4)

c4h6+oh=ch3hco+c2h3                     5.600E+12    0.00    -900.0 !
Exgas
c4h6+o=>ac3h5hco                        3.000E+13    0.00      80.0 !
(85CVE*2.14 RTI)
c4h6+ho2=>c4h6o2h                       2.000E+11    0.00    8000.0 !
(c2h4)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! hoc4h6 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

hoc4h6=>ac3h5hco+h                      5.000E+14    0.00   28000.0 !
(c2h2oh/10)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ac3h5hco reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

ac3h5hco=>c3h6+co                       2.000E+13    0.00   57000.0 !
(11/03/98)
ac3h5hco=>c2h4+ch2co                    5.000E+14    1.00   78000.0 !
(07/07/2000)
ac3h5hco+o=>c2h3o+c2h3o                 1.200E+08    1.44     530.0 !
(c2h4)
ac3h5hco+oh=>ch2co+c2h3+h2o             2.024E+13    0.00    5955.0 !
(c2h4)
ac3h5hco+ho2=>c2h3o+c2h3o+oh            5.000E+12    0.00   14964.0 !
(c3h6*5)
ac3h5hco+h=>ac3h5co+h2                  4.100E+09    1.16    2405.0 !
(ch3hco)
ac3h5hco+oh=>ac3h5co+h2o                2.350E+10    0.73   -1113.0 !
(ch3hco)
ac3h5hco+ho2=>ac3h5co+h2o2              1.700E+12    0.00   10700.0 !
(ch3hco)
ac3h5hco+o=>ac3h5co+oh                  5.850E+12    0.00    1808.0 !
```

```
(ch3hco)
ac3h5hco+ch3=>ac3h5co+ch4               1.700E+12    0.00    8440.0 !
(ch3hco)
ac3h5hco+c2h3=>ac3h5co+c2h4             1.700E+12    0.00    8440.0 !
(ch3hco+ch3)
ac3h5hco+ac3h5=>ac3h5co+c3h6            1.700E+12    0.00    8440.0 !
(ch3hco+ch3)

ac3h5hco+oh=c2h3chcho+h2o               3.120E+06    2.00     -298.0 !
Curran
ac3h5hco+ho2=c2h3chcho+h2o2             9.630E+03    2.60   13910.0 !
Curran
ac3h5hco+ch3o2=c2h3chcho+ch3o2h         1.990E+12    0.00   17050.0 !
Curran

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h6o2h reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c4h6o2h=>acrol+oh+ch2                   1.000E+10    0.00   19500.0 !
(c2h4o2h)
c4h6o2h=>ac3h5hco+oh                    2.000E+11    0.00   19500.0 !
(c2h4o2h)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ac3h5co reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

ac3h5co+h=>ac3h5hco                     5.000E+12    0.00       0.0 !
(12/03/98)
ac3h5co+o2=>acrol+co+oh                 1.000E+12    0.00   25000.0 !
(12/11/97c2h2oh)
ac3h5co=>ch2co+c2h3                     1.000E+15    0.00   65000.0 !
(7/5/97)
ac3h5co=>co+c2h2+ch3                    5.000E+14    0.00   65000.0 !
(14/5/97 /2)

ac3h5co=>ac3h5+co                        6.199E+15  -1.09    -330.0 !
Curran

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c2h3chcho reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c2h3chcho+o=acrol+hco                   2.000E+14  0.00       0.0 !
idem c5h7
c2h3chcho+ho2=oh+acrol+hco              2.000E+14  0.00       0.0 !
idem phch2


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ic4h5 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c2h3+c2h3=ic4h5+h                       7.00E+13  0.0      0.0   !
FAhR  1991
```

```
ic4h5+h=ch3+c3h3                        1.00E+14  0.0     0.0 !  (nn)


ic4h5+o2=c2h3co+ch2o                    2.000E+11    0.00   14000.0 !
(estimee)
ic4h5+o=>ch2co+c2h3                     1.000E+13    0.00    2000.0 !
(c2h3+o <23/4/97)
ic4h5+ho2=ch2co+c2h3+oh                 1.000E+12    0.00    2000.0 !
(c2h3+ho2<30/5/97)
ic4h5+ho2=>ac3h5co+oh                   1.000E+13    0.00    2000.0 !
(c2h3+ho2<23/4/97)
c3h6+ic4h5=ac3h5+c4h6                   1.000E+11    0.00    9800.0 !
(c2h5 14/5/97)
ic4h5+c2h2=c4h6+c2h                     1.800E+11    0.00   17300.0 !
(20/07/2000)
ic4h5+ch2o=c4h6+hco                     4.000E+12    0.00    8840.0 !
(20/07/2000)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! nc4h5 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################
nc4h5=c2h3+c2h2                         5.000E+13    0.00   44000.0 !
(93hID/hIG)
nc4h5+o2=acrol+hco                      2.000E+11    0.00   14000.0 !
(26/6/97 *2)
nc4h5+o=>ac3h5+co                       1.000E+13    0.00    2000.0 !
(c2h3+o <23/4/97)
nc4h5+oh=c4h4+h2o                       2.000E+07    2.00    1000.0 !
(mILLER 92)
nc4h5+ho2=>ac3h5+co+oh                  1.000E+13    0.00       0.0 !
(c2h3+ho2 3/10/97*)
nc4h5+h=c4h4+h2                         1.000E+14    0.00       0.0 !
(LINDSTEDT 95*RTI*7.2-2.4)
nc4h5+h=ic4h5+h                         1.000E+14    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
nc4h5+c2h2=c4h6+c2h                     1.800E+11    0.00   17300.0 !
(20/07/2000)
nc4h5+ch2o=c4h6+hco                     4.000E+12    0.00    8840.0 !
(20/07/2000)
c3h6+nc4h5=ac3h5+c4h6                   1.000E+11    0.00    9800.0 !
(c2h5 14/5/97)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h4 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c4h4=c2h2+c2h2                          3.200E+13    0.00   77100.0 !
(KURZ/FRA89)
c4h4+m=nc4h3+h+m                        1.000E+20    0.00   99300.0 !
(KURZ/FRA89)
c4h4=ic4h3+h                            6.300E+13    0.00   87100.0 !
(92hID/FRA89)
c4h4=c4h2+h2                            1.260E+15    0.00   94700.0 !
(KURZ/FRA89)
c4h4+o2=nc4h3+ho2                       1.000E+13    0.00   63200.0 !
(Est Walker95)
c4h4+o2=ic4h3+ho2                       1.000E+13    0.00   44640.0 !
(Est Walker95)
c4h4+ho2=nc4h3+h2o2                     2.000E+11    0.00   12600.0 !
(Estc4h6)
```

```
c4h4+ho2=ic4h3+h2o2                     1.000E+11    0.00    9920.0 !
(Estc4h6)
c4h4+ho2=c3h3+hco+oh                    4.000E+11    0.00    8000.0 !
(=c2h4+ho2*2)
c4h4+oh=ic4h3+h2o                       2.000E+07    2.00    2000.0 !
(mILLER 92)
c4h4+oh=nc4h3+h2o                       7.500E+06    2.00    5000.0 !
(mILLER 92)
c4h4+o=ac3h4+co                         3.000E+13    0.00    1810.0 !
(LINDST95)
c4h4+h=ic4h3+h2                         3.330E+05    2.53    9240.0 !
(Wang97*RTI/26-8.8)
c4h4+h=nc4h3+h2                         2.000E+07    2.00   15000.0 !
(mILLER 92)
c4h4+c2h=ic4h3+c2h2                     3.980E+13    0.00       0.0 !
(LINDST95)
c4h4+ch3=ic4h3+ch4                      1.660E+01    3.70    9499.0 !
(c2h4)
c4h4+nc4h5=ic4h3+c4h6                   4.000E+11    0.00    5000.0 !
(18/07/2000)
c4h4+ic4h5=ic4h3+c4h6                   4.000E+11    0.00    5000.0 !
(18/07/2000)


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ic4h3 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c2h2+c2h2=ic4h3+h                       6.310E+13    0.00   41600.0 !
(88DUR/AmO)

ic4h3+o2=ch2co+hcco                     1.000E+12    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
ic4h3+oh=c4h2+h2o                       3.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
ic4h3+o=ch2co+c2h                       2.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
ic4h3+o=h2c4o+h                         2.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
ic4h3+h=c4h2+h2                         5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
ic4h3+ch2=ac3h4+c2h                     2.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! nc4h3 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

nc4h3+oh=c4h2+h2o                       3.000E+13    0.00       0.0 !
(LINDST95)
nc4h3+h=c4h2+h2                         5.000E+13    0.00       0.0 !
(LINDST95)
nc4h3+h=ic4h3+h                         1.000E+14    0.00       0.0 !
(mILLER 92)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! h2c4o reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
```

```
!##################

h2c4o+oh=ch2co+hcco                     1.000E+07    2.00    2000.0 !
(mILLER 92)
h2c4o+h=c2h2+hcco                       5.000E+13    0.00    3000.0 !
(mILLER 92)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h2 reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c2h2+c2h=c4h2+h                         1.820E+14    0.00     467.0 !
(91ShI/mIC)

c4h2+m=c4h+h+m                          3.500E+17    0.00   80065.0 !
(78TAN/GAR)
c4h2+oh=h2c4o+h                         6.660E+12    0.00    -410.0 !
(mILLER 92)
c4h2+o=c3h2+co                          1.200E+12    0.00       0.0 !
(mILLER 89)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c4h reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c4h+o2=c2h+co+co                        1.000E+14    0.00       0.0 !
(FRENKLACh 87)

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! butanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

hco+nc3h7=nc3h7hco                      5.200E+12    0.00       0.0  !
CO 5201 KB
nc3h7hco+h=h2+c3h7co                    4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5337
nc3h7hco+oh=h2o+c3h7co                  4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5338
nc3h7hco+ho2=h2o2+c3h7co                1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5339
nc3h7hco+ch3=ch4+c3h7co                 2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5340
nc3h7hco+c2h5=c2h6+c3h7co               1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5341

nc3h7hco+oh=c3h6cho-1+h2o               5.270E+09    0.97    1586.0 !
Curran
                                 rev / 1.089E+09    0.96   21020.0 /
nc3h7hco+ho2=c3h6cho-1+h2o2             9.030E-01    3.65    7153.0 !
Curran
                                 rev / 1.108E+00    3.31    -487.4/
nc3h7hco+ch3o2=c3h6cho-1+ch3o2h         6.030E+12    0.00   19380.0 !
Curran
                                 rev / 3.040E+13   -0.51    6628.0/

c3h7co+M=co+nc3h7+M                     8.640E+15    0.00   14400.0 !
c3h7co+ho2=>co2+oh+nc3h7                2.000E+13    0.00       0.0  !
c3h7co+o2=c3h7co3                       1.200E+11    0.00   -1100.0
```

```
c3h7co3+ho2=c3h7co3h+o2                 1.750E+10    0.00   -3275.0
c3h7co3h=c3h7co2+oh                     5.010E+14    0.00   40150.0
nc3h7+co2=c3h7co2                       2.000E+11    0.00   39360.0

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! butanone REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

butanone+h=>h2+c2h5coch2                2.700E+07    2.00    5000.0  !
FCO 5402
butanone+oh=>h2o+c2h5coch2              7.800E+06    2.00    -765.0  !
FCO 5403
butanone+ho2=>h2o2+c2h5coch2            1.200E+12    0.00   15500.0  !
FCO 5404
butanone+ch3=>ch4+c2h5coch2             6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5405
butanone+ch3o2=>ch3o2h+c2h5coch2        6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5406
butanone+c2h5=>c2h6+c2h5coch2           6.000E+11    0.00   11000.0  !
FCO 5407

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! ch3coc2h4p REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

c2h5coch2=ch2co+c2h5                    1.570E+13    0.00   30000.0
                                 rev / 2.110E+11    0.00    7350.0 /
c2h5coch2+o2=c2h5coch2o2                9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c2h5coch2o2+ho2=c2h5coch2o2h+o2             2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
c2h5coch2o2h=c2h5coch2o+oh                  1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
ch2o+c2h5co=c2h5coch2o                      1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

!c2h4+ch3co=ch3coc2h4p                    1.500E+11    0.00    8300.0
! Curran

ch3coc2h4p=c2h4+ch3co                   5.970E+12    0.00   20730.0
ch3coc2h4p+o2=ch3coc2h4o2                   9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
ch3coc2h4o2+ho2=ch3coc2h4o2h+o2             2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
ch3coc2h4o2h=ch3coc2h4o+oh                  1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
ch2o+ch2coch3=ch3coc2h4o                    1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

ch3coc2h4p+o2=mvk+ho2                    3.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem pc4h9+o2

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c3h6cho-1 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

!c2h4+ch2hco=c3h6cho-1               1.500E+11    0.00    8300.0 !
Curran
```

```
c2h4+ch2hco=c3h6cho-1               2.110E+11    0.00    7350.0 !
Curran
c3h6cho-1+o2=ac3h5hco+ho2           3.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem pc4h9+o2

ch3chch2hco+o2=ac3h5hco+ho2            7.590E+09    0.00   -2000.0 !
(PITZ 88)
ch3chch2hco=c3h6+hco                   8.249E+12   -0.18   21900.0 !
Curran
                                 rev / 1.000E+11    0.00    6000.0 /


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! methylvinylketone mvk REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

mvk+oh=>ch2o+ch2coch3                  1.400E+12    0.00    -900.0
mvk+oh=>ch3+ch3cocho                   1.400E+12    0.00    -900.0

c2h3+ch2co=ch2coc2h3                   2.110E+11     0.00   7350.0 !
idem c2h5+ch2co=c2h5coch2 Curran

!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€        SOUS-mECANISmE C5
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€



!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! pentane nc5h12 reactions
! global step : metathesis + direct decomposition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c2h5+nc3h7=nc5h12                       5.200E+12    0.00       0.0
! CO 5205 KB

nc5h12+h=h2+ch3+2c2h4                   2.700E+07    2.00    5000.0
! ALC 4917
nc5h12+oh=h2o+ch3+2c2h4                 7.800E+06    2.00    -765.0
! ALC 4918
nc5h12+ho2=h2o2+ch3+2c2h4               1.200E+12    0.00   15500.0
! ALC 4919
nc5h12+ch3=ch4+ch3+2c2h4                6.000E+11    0.00    9600.0
! ALC 4920
nc5h12+ch3o2=ch3o2h+ch3+2c2h4           4.500E+12    0.00   17500.0
! ALC 4921
nc5h12+c2h5=c2h6+ch3+2c2h4              6.000E+11    0.00   11000.0
! ALC 4922
nc5h12+o=oh+ch3+2c2h4                   3.400E+07    1.83     550.0
! AOZ 5222

nc5h12+o2cho=Ac5h11+ho2cho             1.680E+13    0.00   20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc5h12+o2cho=Bc5h11+ho2cho             1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
```

```
nc5h12+o2cho=Cc5h11+ho2cho             5.600E+12    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004


!###############
!^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h11 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^
!###############

!**************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!**************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac5h11=nc3h7+c2h4                       2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1697 CW
!Bc5h11=c2h5+c3h6                        2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1724 CW
!Cc5h11=ch3+c4h8                         4.000E+13    0.00   31000.0
! DE 2407 CN

Ac5h11=nc3h7+c2h4                      1.000E+13    0.00   28369.0  !
Tsang et al. 1998 27th Symp. Int. Comb. pp. 135-142
Bc5h11=c2h5+c3h6                       8.000E+12    0.00   27395.5  !
Tsang et al. 1998 27th Symp. Int. Comb. pp. 135-142
Cc5h11=ch3+c4h8                        1.800E+13    0.00   29351.0  !
Tsang et al. 1998 27th Symp. Int. Comb. pp. 135-142

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac5h11=h+c5h10                          3.000E+13    0.00   38000.0
! DE 1698 CN
!Bc5h11=h+c5h10                          3.000E+13    0.00   39000.0
! DE 1725 CN
!Bc5h11=h+c2c5h10                        3.000E+13    0.00   38000.0
! DE 1726 CN
!Bc5h11=h+t2c5h10                        3.000E+13    0.00   38000.0
! DE 1726 CN
!Cc5h11=h+c2c5h10                        6.000E+13    0.00   38000.0
! DE 2408 CN
!Cc5h11=h+t2c5h10                        6.000E+13    0.00   38000.0
! DE 2408 CN

Ac5h11=h+c5h10                         3.410E+15   -0.69   36589.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc5h11=h+c5h10                         6.760E+12    0.07   37652.0 !
estimated from reverse constant k=4.2E+11.T^0.51.exp(-1230/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc5h11=h+c2c5h10                       2.220E+15   -0.71   37356.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc5h11=h+t2c5h10                       1.140E+15   -0.71   36161.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
```

```
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc5h11=h+c2c5h10                       4.440E+15   -0.695  37310.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc5h11=h+t2c5h10                       2.280E+15   -0.70   36114.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac5h11+o2=c5h10+ho2                    1.900E+12    0.00    5000.0 !
Bc5h11+o2=c2c5h10+ho2                  1.000E+11    0.00    5020.0 !
Bc5h11+o2=t2c5h10+ho2                  2.000E+11    0.00    5020.0 !
Bc5h11+o2=c5h10+ho2                    2.000E+11    0.00    5020.0 !
Cc5h11+o2=c2c5h10+ho2                  3.580E+09    0.00   -3532.0 !
Cc5h11+o2=t2c5h10+ho2                  3.580E+09    0.00   -3532.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!Ac5h11=Bc5h11                          5.700E+08    1.00   17300.0
! IS 228 KB

!Ac5h11=Bc5h11                          9.840E+10    0.00   19660.0
! mati

Ac5h11=Bc5h11                          1.000E+12    0.00   22515.0 !
Tsang et al. 1998 27th Symp. Int. Comb. pp. 135-142
                                 rev / 3.000E+11    0.00   23906.0 /
Ac5h11=Cc5h11                          3.000E+11    0.00   24045.0 !
Tsang et al. 1998 27th Symp. Int. Comb. pp. 135-142
                                 rev / 1.000E+11    0.00   25436.0 /

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!Ac5h11+o2=c5h11qjA                     4.820E+36   -8.23    5167.0
!DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!!Bc5h11+o2=c5h11qjB                     1.840E+45  -11.10    6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!!Cc5h11+o2=c5h11qjC                     1.840E+45  -11.10    6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!Ac5h11+o2=c5h11qjA                     9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!Bc5h11+o2=c5h11qjB                     1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!Cc5h11+o2=c5h11qjC                     1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

Ac5h11+ho2=>ch2o+pc4h9+oh              1.000E+13    0.00       0.0
Ac5h11+o=ch2o+pc4h9                    1.610E+13    0.00       0.0
Ac5h11+o2=ch2o+oh+c4h8                 2.100E+11    0.00    6158.0

Bc5h11+ho2=>ch3hco+oh+nc3h7            1.000E+13    0.00       0.0
Bc5h11+o=ch3hco+nc3h7                  1.610E+13    0.00       0.0
Bc5h11+o2=>oh+ch3hco+c3h6              2.100E+11    0.00    6158.0

Cc5h11+ho2=>oh+ethco+c2h5              1.000E+13    0.00       0.0
Cc5h11+o=ethco+c2h5                    1.610E+13    0.00       0.0
```

```
Cc5h11+o2=>oh+ethco+c2h4               2.100E+11    0.00    6158.0

!#################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h11qj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#################

!**************************
! 1) isomerisation to QOOh
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!**************************


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h11qjA=c5h10rBqA                     3.300E+09    1.00   32500.0  !
IS 252 KB
c5h11qjA=c5h10rCqA                     5.700E+08    1.00   25000.0  !
IS 253 KB
c5h11qjA=c5h10rDqA                     9.900E+07    1.00   22000.0  !
IS 254 KB
c5h11qjA=c5h10rEqA                     2.500E+07    1.00   24000.0  !
IS 255 KB

c5h11qjB=c5h10rAqB                     5.000E+09    1.00   35500.0  !
IS 313 KB
c5h11qjB=c5h10rCqB                     3.300E+09    1.00   32500.0  !
IS 314 KB
c5h11qjB=c5h10rDqB                     5.700E+08    1.00   25000.0  !
IS 315 KB
c5h11qjB=c5h10rEqB                     1.500E+08    1.00   25000.0  !
IS 316 KB

c5h11qjC=c5h10rAqC                     1.700E+09    1.00   28000.0  !
IS 657 KB
c5h11qjC=c5h10rBqC                     6.700E+09    1.00   32500.0  !
IS 686 KB


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h11qjA+ho2=nc5h11o2h+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c5h11qjB+ho2=nc5h11o2h+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c5h11qjC+ho2=nc5h11o2h+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h10rXqjY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

!**************************
! 1) isomerisation
```

```
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
!***************************

c5h10rDqA=c3h6+c2h4o2h                 2.000E+13     0.00   28700.0 !
c5h10rEqA=c2h4+c3h6ooh1-3              2.000E+13     0.00   28700.0 !

c5h10rEqB=c2h4+c3h6ooh2-1              2.000E+13     0.00   28700.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation
! c5h10rYqX=c5h10rZqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rBqA=c5h10rEqA                    8.600E+08    1.00   19800.0  !
IS 310 KB
c5h10rDqA=c5h10rAqA                    5.700E+08    1.00   15300.0  !
IS 311 KB
c5h10rEqA=c5h10rAqA                    9.900E+07    1.00   10000.0  !
IS 312 KB

c5h10rAqB=c5h10rDqB                    5.700E+08    1.00   17300.0  !
IS 513 KB
c5h10rAqB=c5h10rEqB                    1.500E+08    1.00   14500.0  !
IS 514 KB
c5h10rEqB=c5h10rBqB                    2.900E+08    1.00   13300.0  !
IS 515 KB

c5h10rAqC=c5h10rBqC                    5.700E+08    1.00   17300.0  !
IS 658 KB


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c5h10rYqX+o2=c5h10qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c5h10rAqA+o2=c5h10qjAqA                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c5h10rBqA+o2=c5h10qjBqA                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c5h10rCqA+o2=c5h10qjCqA                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c5h10rDqA+o2=c5h10qjDqA                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c5h10rEqA+o2=c5h10qjEqA                4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

!c5h10rAqB+o2=c5h10qjAqB                4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!c5h10rBqB+o2=c5h10qjBqB                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c5h10rCqB+o2=c5h10qjCqB                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c5h10rDqB+o2=c5h10qjDqB                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c5h10rEqB+o2=c5h10qjEqB                4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
```

```
!c5h10rAqC+o2=c5h10qjAqC                4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!c5h10rBqC+o2=c5h10qjBqC                1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rAqA+o2=c5h10qjAqA                9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c5h10rBqA+o2=c5h10qjBqA                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c5h10rCqA+o2=c5h10qjCqA                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c5h10rDqA+o2=c5h10qjDqA                1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c5h10rEqA+o2=c5h10qjEqA                9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c5h10rAqB+o2=c5h10qjAqB                1.500E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
c5h10rBqB+o2=c5h10qjBqB                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c5h10rCqB+o2=c5h10qjCqB                1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c5h10rDqB+o2=c5h10qjDqB                1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c5h10rEqB+o2=c5h10qjEqB                9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c5h10rAqC+o2=c5h10qjAqC                9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c5h10rBqC+o2=c5h10qjBqC                9.500E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!


c5h10rCqA=>oh+ch2o+c4h8                5.000E+13    0.00   25500.0  !
c5h10rAqC=>oh+ethco+c2h4               5.000E+13    0.00   25500.0  !
c5h10rDqB=>oh+ch3hco+c3h6              5.000E+13    0.00   25500.0  !


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) o-o breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rAqA=oh+nc4h9hco                  1.000E+09    0.00    7500.0  !
DE 1966 CW
c5h10rBqB=oh+c3h7coch3                 1.000E+09    0.00    7500.0  !
DE 2299 CW


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
!   (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rBqA=oh+c5h10o#3                  6.100E+11    0.00   17950.0  !
OR 2445 CR
c5h10rCqA=oh+c5h10o#4                  9.200E+10    0.00   16600.0  !
OR 2446 CR
c5h10rDqA=oh+c5h10o#5                  2.100E+08    0.00    6500.0  !
```

```
OR 2447 CR
c5h10rEqA=oh+c5h10o#6                  1.700E+08    0.00    1950.0  !
OR 2448 CR

c5h10rAqB=oh+c5h10o#3                  6.100E+11    0.00   17950.0  !
OR 2495 CR
c5h10rCqB=oh+c5h10o#3                  6.100E+11    0.00   17950.0  !
OR 2496 CR
c5h10rDqB=oh+c5h10o#4                  9.200E+10    0.00   16600.0  !
OR 2497 CR
c5h10rEqB=oh+c5h10o#5                  2.100E+08    0.00    6500.0  !
OR 2498 CR

c5h10rAqC=oh+c5h10o#4                  9.200E+10    0.00   16600.0  !
OR 2561 CR
c5h10rBqC=oh+c5h10o#3                  6.100E+11    0.00   17950.0  !
OR 2567 CR


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
!    alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rAqB=ho2+c5h10                    8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 1967 CR
c5h10rBqA=ho2+c5h10                    8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 1776 CR
c5h10rBqC=ho2+c2c5h10                  8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2382 CR
c5h10rBqC=ho2+t2c5h10                  8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2382 CR
c5h10rCqB=ho2+c2c5h10                  8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 1969 CR
c5h10rCqB=ho2+t2c5h10                  8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 1969 CR


!######################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h10qjXqY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!######################

!***************************
! ketohydroperoxides formation
!***************************

c5h10qjBqA=oh+c5h9oAqB                 3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
c5h10qjCqA=oh+c5h9oAqC                 9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
c5h10qjDqA=oh+c5h9oAqD                 9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
c5h10qjEqA=oh+c5h9oAqE                 1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

c5h10qjAqB=oh+c5h9oBqA                 1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
c5h10qjCqB=oh+c5h9oBqC                 1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
c5h10qjDqB=oh+c5h9oBqD                 2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
c5h10qjEqB=oh+c5h9oBqE                 4.945E+07    1.00   19000.0 !
```

```
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c5h10qjAqC=oh+c5h9oCqA                 2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
c5h10qjBqC=oh+c5h9oCqB                 1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!##########################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! nc5h11o2h, c5h9o2h and c5h9e2qC REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##########################################

!***************************
! hydroperoxydes decomposition
!***************************

nc5h11o2h=>oh+ch2o+pc4h9               1.500E+16    0.00   42000.0  !
DKh 4880
c5h9o2h=>oh+ch2o+c2h4+c2h3             1.500E+16    0.00   42000.0  !
DKh 4888
c5h9e2qC=>oh+ch2o+c2h4+c2h3            1.500E+16    0.00   42000.0  !
DKh 4896


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h9oq REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!********************************
! Ketohydroperoxide decomposition
!********************************

!c5h9oAqA=oh+co2+pc4h9                  1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oAqB=oh+hco+nc3h7hco               1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oAqC=oh+ch2hco+ethco               1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oAqD=oh+ch3hco+ch2ch2hco           1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oAqE=oh+ch2o+c3h6cho-1             1.000E+16    0.00   43000.0
!

!c5h9oBqA=oh+ch2o+c3h7co                1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oBqC=oh+ch3co+ethco                1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oBqD=oh+ch3hco+ch2coch3            1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oBqE=oh+c2h4+ch3co+ch2o            1.000E+16    0.00   43000.0
!

!c5h9oCqA=oh+c2h5+ch2co+ch2o            1.000E+16    0.00   43000.0
!
!c5h9oCqB=oh+c2h5co+ch3hco              1.000E+16    0.00   43000.0
!

c5h9oAqA=oh+co2+pc4h9                  7.500E+15    0.00   44500.0 !
c5h9oAqB=oh+hco+nc3h7hco               7.500E+15    0.00   44500.0 !
c5h9oAqC=oh+ch2hco+ethco               7.500E+15    0.00   44500.0 !
c5h9oAqD=oh+ch3hco+ch2ch2hco           7.500E+15    0.00   44500.0 !
```

```
c5h9oAqE=oh+ch2o+c3h6cho-1              7.500E+15    0.00   44500.0 !

c5h9oBqA=oh+ch2o+c3h7co                 7.500E+15    0.00   44500.0 !
c5h9oBqC=oh+ch3co+ethco                 7.500E+15    0.00   44500.0 !
c5h9oBqD=oh+ch3hco+ch2coch3             7.500E+15    0.00   44500.0 !
c5h9oBqE=oh+ch3coc2h4p+ch2o             7.500E+15    0.00   44500.0 !

c5h9oCqA=oh+c2h5coch2+ch2o              7.500E+15    0.00   44500.0 !
c5h9oCqB=oh+c2h5co+ch3hco               7.500E+15    0.00   44500.0 !


!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h10o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

!*********************************
! O-ring decomposition
!*********************************

c5h10o#3+h=>h2+ch2co+ch3+c2h4           2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 4959
c5h10o#3+oh=>h2o+ch2co+ch3+c2h4         7.800E+06    2.00    -765.0  !
DOR 4960
c5h10o#3+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+c2h4       1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 4961
c5h10o#3+ch3=>ch4+ch2co+ch3+c2h4        6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 4962
c5h10o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+c2h4   6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 4963
c5h10o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+c2h4      6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 4964
c5h10o#3+o=>oh+hco+c2h4                 7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5108

c5h10o#4+h=>h2+hco+c2h4                 2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 5013
c5h10o#4+oh=>h2o+c2h5coc2h4p            7.800E+06    2.00    -765.0  !
c5h10o#4+oh=>h2o+ac3h5hco+ch3           7.800E+06    2.00    -765.0  !
c5h10o#4+oh=>h2o+hco+c4h8               7.800E+06    2.00    -765.0  !
c5h10o#4+ho2=>h2o2+hco+c2c2h4           1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 5015
c5h10o#4+ch3=>ch4+hco+c2c2h4            6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 5016
c5h10o#4+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2c2h4       4.500E+12    0.00   17500.0  !
DOR 5017
c5h10o#4+c2h5=>c2h6+hco+c2c2h4          6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 5018
c5h10o#4+o=>oh+hco+c2c2h4               7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5109

c5h10o#6+h=>h2+ch2ch2hco+c2h4           2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 5025
c5h10o#6+oh=>h2o+ch2ch2hco+c2h4         7.800E+06    2.00    -765.0  !
DOR 5026
c5h10o#6+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c2h4       1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 5027
c5h10o#6+ch3=>ch4+ch2ch2hco+c2h4        6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 5028
c5h10o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2ch2hco+c2h4   4.500E+12    0.00   17500.0  !
DOR 5029
c5h10o#6+c2h5=>c2h6+ch2ch2hco+c2h4      6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 5030
```

```
c5h10o#6+o=>oh+ch2ch2hco+c2h4           7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5111

!c5h10o#5+h=h2+Ac5h9o#5                  2.700E+07    2.00    5000.0
!
!c5h10o#5+oh=h2o+Ac5h9o#5                7.800E+06    2.00    -765.0
!
!c5h10o#5+ho2=h2o2+Ac5h9o#5              1.200E+12    0.00   15500.0
!
!c5h10o#5+ch3=ch4+Ac5h9o#5               6.000E+11    0.00    9600.0
!
!c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+Ac5h9o#5          4.500E+12    0.00   17500.0
!
!c5h10o#5+c2h5=c2h6+Ac5h9o#5             6.000E+11    0.00   11000.0
!
!c5h10o#5+o=oh+Ac5h9o#5                  7.800E+13    0.00    5200.0
!

c5h10o#5+h=h2+c4h8hco-2                 2.700E+07    2.00    5000.0  !
c5h10o#5+oh=h2o+c4h8hco-2               7.800E+06    2.00    -765.0  !
c5h10o#5+ho2=h2o2+c4h8hco-2             1.200E+12    0.00   15500.0  !
c5h10o#5+ch3=ch4+c4h8hco-2              6.000E+11    0.00    9600.0  !
c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+c4h8hco-2         4.500E+12    0.00   17500.0  !
c5h10o#5+c2h5=c2h6+c4h8hco-2            6.000E+11    0.00   11000.0  !
c5h10o#5+o=oh+c4h8hco-2                 7.800E+13    0.00    5200.0  !

!c5h10o#5+h=h2+Dc5h9o#5                  1.350E+07    2.00    5000.0
!
!c5h10o#5+oh=h2o+Dc5h9o#5                3.900E+06    2.00    -765.0
!
!c5h10o#5+ho2=h2o2+Dc5h9o#5              6.000E+11    0.00   15500.0
!
!c5h10o#5+ch3=ch4+Dc5h9o#5               3.000E+11    0.00    9600.0
!
!c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+Dc5h9o#5          2.250E+12    0.00   17500.0
!
!c5h10o#5+c2h5=c2h6+Dc5h9o#5             3.000E+11    0.00   11000.0
!
!c5h10o#5+o=oh+Dc5h9o#5                  3.900E+13    0.00    5200.0
!

c5h10o#5+h=h2+c3h6coch3-1               1.350E+07    2.00    5000.0  !
c5h10o#5+oh=h2o+c3h6coch3-1             3.900E+06    2.00    -765.0  !
c5h10o#5+ho2=h2o2+c3h6coch3-1           6.000E+11    0.00   15500.0  !
c5h10o#5+ch3=ch4+c3h6coch3-1            3.000E+11    0.00    9600.0  !
c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+c3h6coch3-1       2.250E+12    0.00   17500.0  !
c5h10o#5+c2h5=c2h6+c3h6coch3-1          3.000E+11    0.00   11000.0  !
c5h10o#5+o=oh+c3h6coch3-1               3.900E+13    0.00    5200.0  !

Ac5h9o#5=c3h6+ch2hco                    5.000E+13    0.00   28800.0
!Dc5h9o#5=c3h6coch3-1                   5.000E+13    0.00   28800.0


!#################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h10 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#################


!*********************************
! 1) addition of h and ch3
! 2) addition of Oh
! 3) addition of O
```

```
! 4) addition of ho2
! 5) decomposition by R
!*********************************

c5h10=c2h5+ac3h5                        9.173E+20   -1.63   73990.0 !
Westbrook 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) addition of h and ch3
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10+ch3=nc3h7+c3h6                    9.600E+10    0.00    8000.0 !
Buda

c2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8                  1.700E+11    0.00    7400.0  !
ROL 5175
t2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8                  1.700E+11    0.00    7400.0  !
ROL 5175

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition of Oh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10+oh=pc4h9+ch2o                     1.000E+11    0.00       0.0 !
Curran 1998
c5h10+oh=nc3h7+ch3hco                   1.000E+11    0.00       0.0 !
Curran 1998

c2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco                1.000E+12    0.00       0.0  !
t2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco                1.000E+12    0.00       0.0  !
c2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9                  1.000E+12    0.00       0.0  !
t2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9                  1.000E+12    0.00       0.0  !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) addition of O
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10+o=pc4h9+hco                       1.000E+11    0.00       0.0 !
Curran 1998
c5h10+o=nc3h7+ch3co                     1.000E+11    0.00       0.0 !
Curran 1998

c2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4             3.400E+07    1.83     550.0  !
AOZ 5222
t2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4             3.400E+07    1.83     550.0  !
AOZ 5222

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) decomposition by R
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10+h=h2+Cc5h9-1                      5.400E+04    2.50   -1900.0 !
Buda 2 allylic H
c5h10+oh=h2o+Cc5h9-1                    3.100E+06    2.00    -300.0 !
c5h10+ho2=Cc5h9-1+h2o2                  6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c5h10+ch3=ch4+Cc5h9-1                   1.000E+11    0.00    7300.0 !
Buda
c5h10+ch3o2=ch3o2h+Cc5h9-1              1.000E+12    0.00   14550.0 !
Buda
c5h10+c2h5=c2h6+Cc5h9-1                 4.400E+00    3.50    4140.0 !
Buda
c5h10+o=oh+Cc5h9-1                      8.800E+10    0.70    3250.0 !
Buda
```

```
c5h10+h=Dc5h9-1+h2                      9.000E+06    2.00    5000.0
c5h10+oh=Dc5h9-1+h2o                    1.000E+06    2.00    -597.0 !
idem Alkanes
c5h10+ho2=Dc5h9-1+h2o2                  2.000E+04    2.50   14208.0 !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
!c5h10+o=Dc5h9-1+oh                      1.130E+03    3.30    1650.0
!c5h10+ch3=Dc5h9-1+ch4                   8.000E+11    0.00    9500.0

c5h10+h=Ec5h9-1+h2                      2.850E+07    2.00    7700.0
c5h10+oh=Ec5h9-1+h2o                    7.050E+06    1.80     974.0 !
idem alkanes
c5h10+ho2=Ec5h9-1+h2o2                  1.800E+04    2.50   16683.0 !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
!c5h10+o=Ec5h9-1+oh                      4.360E+06    2.40    5500.0
!c5h10+ch3=Ec5h9-1+ch4                   1.300E12     0.00   11600.0


sc3h5+c2h5=c2c5h10                      1.000E+13    0.00       0.0  !
TER 5452
sc3h5+c2h5=t2c5h10                      1.000E+13    0.00       0.0  !
TER 5452


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c5h9-1 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!Cc5h9-1=c4h6+ch3                        2.500E+13    0.00   45000.0 !
(PITZ94)  25/06/04
!Cc5h9-1=c4h6+ch3                        1.339E+15   -0.52   38320.0 !
Curran
Cc5h9-1=c4h6+ch3                        6.500E+12    0.00   38200.0 !
Buda
!Dc5h9-1=c5h8-13+h                       1.200E+13    0.00   27600.0 !
Dc5h9-1=c5h8-13+h                       3.200E+13    0.00   34800.0 !
Buda
!Ec5h9-1=ac3h5+c2h4                      2.500E+13    0.00   45000.0 !
Curran
!Ec5h9-1=ac3h5+c2h4                      1.000E+13    0.00   30000.0 !
Ristori
Ec5h9-1=ac3h5+c2h4                      3.300E+13    0.00   22500.0 !
Buda

Cc5h9-1+h=c5h10                         1.000E+13    0.00       0.0 !
(RTI)
Cc5h9-1+h=c2c5h10                       1.000E+13    0.00       0.0 !
(RTI)
Cc5h9-1+h=t2c5h10                       1.000E+13    0.00       0.0 !
(RTI)
!Cc5h9-1=c5h8-13+h                       4.000E+13    0.00   47000.0 !
(ESTImEE)  22/06/04
Cc5h9-1=c5h8-13+h                       1.500E+13    0.00   50500.0 !
Buda
Cc5h9-1+o2=c5h8-13+ho2                  5.900E+05    0.00       0.0 !
(81BAL/WAL 753K)  23/06/04
Cc5h9-1+ho2=>acrol+c2h5+oh              1.000E+13    0.00       0.0 !
(EST/RAD+ho2)/2 Ristori      23/06/04
Cc5h9-1+h=c5h8-13+h2                    3.160E+13    0.00       0.0 !
(EST Cc4h7-1+h)
Cc5h9-1+ch3=c5h8-13+ch4                 1.000E+13    0.00       0.0 !
( mIChAEL85)
```

```
Cc5h9-1+c2h3=c5h8-13+c2h4               4.000E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
Cc5h9-1+c2h5=c5h8-13+c2h6               4.000E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
Cc5h9-1+ac3h5=c5h8-13+c3h6              1.330E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE) 23/06/04



!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!**** Penta-1,3-diène reactions c5h8-13 ****
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

nc4h5+ch3=c5h8-13                       2.000E+13    0.00       0.0 !
(EST 22/4/97)
sc3h5+c2h3=c5h8-13                      1.000E+13    0.00       0.0 !
(15/10/96)
ac3h5+c2h3=c5h8-13                      1.000E+13    0.00       0.0 !
(15/10/96)
ic4h5+ch3=c5h8-13                       4.800E+37   -7.581  11359.0 !
(6/10/97c2h6/5)

c5h8-13+o2=acrol+ch3hco                 2.000E+08    1.50   30200.0 !
(EST/c2h2+o2)
c5h8-13+ho2=>acrol+c2h4+oh              5.000E+11    0.00   19000.0 !
(EST/ac3h4+ho2)
c5h8-13+ho2=>c4h6+ch2o+oh               5.000E+11    0.00   19000.0 !
(EST/ac3h4+ho2)
c5h8-13+oh=ch3hco+ac3h5                 6.000E+12    0.00    -393.0 !
(EST/c4h6+oh)
c5h8-13+oh=ch2o+Cc4h7-1                 6.000E+12    0.00    -393.0 !
(EST/c4h6+oh)
c5h8-13+o=acrol+c2h4                    4.500E+08    1.45    -858.0 !
(EST/c4h6+o)
c5h8-13+o=ch2o+c4h6                     4.500E+08    1.45    -858.0 !
(EST/c4h6+o)
c5h8-13+h=c5h7+h2                       7.000E+06    2.00       0.0 !
(mARINOV 96)
c5h8-13+h=ac3h5+c2h4                    3.350E+08    1.50    2000.0 !
(mARINOV 96)
c5h8-13+oh=c5h7+h2o                     7.000E+06    2.00       0.0 !
(mARINOV 96)
c5h8-13+ho2=c5h7+h2o2                   2.000E+11    0.00   12600.0 !
(15/10/97c4h6)
c5h8-13+ch3=c5h7+ch4                    2.000E+14    0.00   22800.0 !
(12/11/97c4h6)

c5h8-14+oh=c5h7+h2o                     3.000E+06    2.00   -1520.0 !
idem c5h8-13
c5h8-14+h=c5h7+h2                       5.500E+04    2.50   -1900.0
c5h8-14+o=c5h7+oh                       9.000E+10    0.70    3250.0
c5h8-14+ho2=c5h7+h2o2                   7.500E+03    2.60   12400.0
c5h8-14+ch3=c5h7+ch4                    1.000E+11    0.00    7300.0

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!**** Penta-1,3-diènyle radical reactions c5h7 ****
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

c5h7+o=acrol+c2h3                       2.000E+14   0.0       0.0 !
```

```
(mARINOV 96)
c5h7+h=c5h8-13                          1.000E+14   0.0       0.0 !
(mARINOV 96)
c5h7=CPD+h                              2.000E+11   0.0   18000.0 !
(08/09/2000)
c5h7+cyc6h12=c5h8-13+cyc6h11            1.000E+12   0.0   10000.0 !
(08/09/2000)

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! pentanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

nc4h9hco+h=h2+nc4h9co                   4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5342
nc4h9hco+oh=h2o+nc4h9co                 4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5343
nc4h9hco+ho2=h2o2+nc4h9co               1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5344
nc4h9hco+ch3=ch4+nc4h9co                2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5345
nc4h9hco+c2h5=c2h6+nc4h9co              1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5346

nc4h9co+M=co+pc4h9+M                    8.640E+15    0.00   14400.0 !
nc4h9co+ho2=>co2+oh+pc4h9               2.000E+13    0.00       0.0  !


!************************
! c4h8hco-2
!************************

c4h8hco-2=c3h6+ch2hco                   2.000E+13    0.00   24367.3 !
selon Dean dh+7000
c4h8hco-2+o2=c4h7hco-1+ho2              7.500E+09    0.00   -2000.0 !
(sc4h9+o2=c4h8+ho2)
c4h8hco-2+o2=c4h7hco-2+ho2              1.800E+10    0.00   -2000.0 !
(sc4h9+o2=2c4h8+ho2)


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! pent-4-énal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

c4h7hco-1+h=h2+c4h7co-1                 4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5342
c4h7hco-1+oh=h2o+c4h7co-1               4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5343
c4h7hco-1+ho2=h2o2+c4h7co-1             1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5344
c4h7hco-1+ch3=ch4+c4h7co-1              2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5345
c4h7hco-1+c2h5=c2h6+c4h7co-1            1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5346

c4h7co-1=>co+Dc4h7-1                    2.000E+13    0.00   28700.0 !
Curran c2h5co=c2h5+co ! COR 5374
c4h7co-1+ho2=>co2+oh+Dc4h7-1            2.000E+13    0.00        0.0
!

c4h7hco-2+h=h2+c4h7co-2                 4.000E+13    0.00    4200.0  !
```

```
ALD 5342
c4h7hco-2+oh=h2o+c4h7co-2               4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5343
c4h7hco-2+ho2=h2o2+c4h7co-2             1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5344
c4h7hco-2+ch3=ch4+c4h7co-2              2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5345
c4h7hco-2+c2h5=c2h6+c4h7co-2            1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5346

c4h7co-2=>co+Cc4h7-1                    2.000E+13    0.00   28700.0 !
Curran c2h5co=c2h5+co ! COR 5374
c4h7co-2+ho2=>co2+oh+Cc4h7-1            2.000E+13    0.00        0.0
!


!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! 2-pentanone REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

c3h7coch3+oh=c3h6coch3-1+h2o            2.065E+07    1.73     753.0 !
Curran
                                rev /  3.604E+06    1.75   20170.0 /
c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-1+h2o2          2.380E+04    2.55   16490.0 !
Curran
                                rev /  2.465E+04    2.24    4442.0 /
!c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-1+ch3o2h     3.010E+12    0.00   19380.0 !
Curran
!                                rev /  1.281E+13   -0.49    6607.0 /
c3h7coch3+o=c3h6coch3-1+oh              2.250E+13    0.00    7700.0 !
Curran
c3h7coch3+h=c3h6coch3-1+h2              9.160E+06    2.00    7700.0 !
Curran
c3h7coch3+o2=c3h6coch3-1+ho2            2.050E+13    0.00   51310.0 !
Curran
c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-1+ch4           3.190E+01    3.17    7172.0 !
Curran
!c3h7coch3+ch3o=c3h6coch3-1+ch3oh       2.170E+11    0.00    6460.0 !
Curran
!c3h7coch3+c2h3=c3h6coch3-1+c2h4        5.000E+11    0.00   10400.0 !
Curran
!c3h7coch3+c2h5=c3h6coch3-1+c2h6        5.000E+10    0.00   13400.0 !
Curran

c3h7coch3+oh=c3h6coch3-2+h2o            3.615E+07    1.64    -247.0 !
Curran
                                rev /  3.668E+05    2.01   21660.0 /
c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-2+h2o2          5.600E+12    0.00   17700.0 !
Curran
                                rev /  3.373E+11    0.05    8142.0 /
!c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-2+ch3o2h     1.990E+12    0.00   17050.0 !
Curran
!                                rev /  4.926E+11   -0.13    6774.0 /

c3h7coch3+oh=c3h6coch3-3+h2o            8.450E+11    0.00    -228.0 !
Curran
                                rev /  2.368E+13   -0.28   28700.0 /
c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-3+h2o2          2.000E+11    0.00    8698.0 !
Curran
                                rev /  3.327E+13   -0.60    6160.0 /
!c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-3+ch3o2h     2.000E+12    0.00   15250.0 !
Curran
```

```
!                               rev /  1.367E+15   -0.78   11990.0 /
c3h7coch3+o=c3h6coch3-3+oh              3.070E+13    0.00    3400.0 !
Curran
c3h7coch3+h=c3h6coch3-3+h2              4.460E+06    2.00    3200.0 !
Curran
c3h7coch3+o2=c3h6coch3-3+ho2            1.550E+13    0.00   41970.0 !
Curran
c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-3+ch4           1.740E+00    3.46    3680.0 !
Curran
!c3h7coch3+ch3o=c3h6coch3-3+ch3oh       1.450E+11    0.00    2771.0 !
Curran
!c3h7coch3+c2h3=c3h6coch3-3+c2h4        3.000E+11    0.00    3400.0 !
Curran
!c3h7coch3+c2h5=c3h6coch3-3+c2h6        3.000E+10    0.00    8600.0 !
Curran

c3h7coch3+oh= nc3h7coch2+h2o            5.100E+11    0.00    1192.0 !
Curran
                                rev /  9.286E+13   -0.74   27730.0/
c3h7coch3+ho2=nc3h7coch2+h2o2           2.380E+04    2.55   14690.0 !
Curran
                                rev /  2.572E+07    1.48    9762.0 /
!c3h7coch3+ch3o2=nc3h7coch2+ch3o2h      3.010E+12    0.00   17580.0
! Curran
!                               rev /  1.337E+16   -1.25   11930.0 /
c3h7coch3+o=nc3h7coch2+oh               5.000E+12    0.00    5962.0 !
Curran
c3h7coch3+h=nc3h7coch2+h2               9.300E+12    0.00    6357.0 !
Curran
c3h7coch3+o2=nc3h7coch2+ho2             2.050E+13    0.00   49150.0 !
Curran
c3h7coch3+ch3=nc3h7coch2+ch4            1.620E+11    0.00    9630.0 !
Curran
!c3h7coch3+ch3o=nc3h7coch2+ch3oh        2.170E+11    0.00    4660.0
! Curran
!c3h7coch3+c2h3=nc3h7coch2+c2h4         6.150E+10    0.00    4278.0
! Curran
!c3h7coch3+c2h5=nc3h7coch2+c2h6         5.000E+10    0.00   11600.0
! Curran

c3h6coch3-1+o2=ch3coc3h6o2-1            9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
ch3coc3h6o2-1+ho2=ch3coc3h6o2h-1+o2     2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
ch3coc3h6o2h-1=ch3coc3h6o-1+oh              1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
ch2o+ch3coc2h4p=ch3coc3h6o-1            1.500E+11    0.00   11900.0 !
18  anc7, alk to te


c3h6coch3-1=c2h4+ch2coch3               2.904E+16   -1.21   27000.0 !
Curran
                                rev /  1.000E+11    0.00    8600.0 /
c3h6coch3-2=c3h6+ch3co                  2.719E+16   -1.05   25590.0 !
Curran
                                rev /  1.000E+11    0.00    7800.0 /
c3h6coch3-3=mvk+ch3                     9.615E+15   -0.75   32390.0 !
Curran
                                rev /  1.000E+11    0.00    7800.0 /
nc3h7coch2=nc3h7+ch2co                  1.226E+18   -1.40   43450.0
                                 rev / 1.000E+11    0.00   11600.0 /
nc3h7coch2+o2=nc3h7coch2o2                  9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc3h7coch2o2+ho2=nc3h7coch2o2h+o2       2.290E+11    0.00   -1790.0 !
```

```
Atkinson et al., 2001
nc3h7coch2o2h=nc3h7coch2o+oh           1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
ch2o+c3h7co=nc3h7coch2o                    1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4p+h2o          1.054E+10    0.97    1586.0 !
Curran
                                 rev /  1.194E+09    0.95   21030.0 /
c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4p+h2o2        4.760E+04    2.55   16490.0 !
Curran
                                 rev /  3.201E+04    2.20    4472.0 /
c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4p+ho2          4.100E+13    0.00   51310.0 !
Curran
                                 rev /  1.949E+10    0.31   -1882.0 /
c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4p+h2            1.832E+07    2.00    7700.0 !
Curran
                                 rev /  4.794E+05    1.98   11990.0 /
!c2h5coc2h5+c2h3=c2h5coc2h4p+c2h4      1.000E+12    0.00   10400.0 !
Curran
!                                 rev /  3.850E+08    0.81   14040.0 /
!c2h5coc2h5+c2h5=c2h5coc2h4p+c2h6      1.000E+11    0.00   13400.0 !
Curran
!                                 rev /  1.070E+13   -0.58   14000.0 /
!c2h5coc2h5+ch3o=c2h5coc2h4p+ch3oh     4.340E+11    0.00    6460.0 !
Curran
!                                 rev /  5.475E+09    0.00    9020.0 /
!c2h5coc2h5+ch3o2=c2h5coc2h4p+ch3o2h   6.020E+12    0.00   19380.0 !
Curran
!                                 rev /  1.664E+13   -0.52    6642.0 /

c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4s+h2o          1.690E+12    0.00    -228.0 !
Curran
                                 rev /  3.296E+13   -0.32   28740.0 /
c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4s+h2o2        4.000E+11    0.00    8698.0 !
Curran
                                 rev /  4.631E+13   -0.65    6200.0 /
c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4s+ho2          3.100E+13    0.00   41970.0 !
Curran
                                 rev /  2.537E+12    0.00   -1702.0 /
c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4s+h2            8.960E+06    2.00    3200.0 !
Curran
                                 rev /  4.036E+07    1.68   17010.0 /
!c2h5coc2h5+c2h3=c2h5coc2h4s+c2h4      6.000E+11    0.00    5600.0 !
Curran
!                                 rev /  3.976E+10    0.50   18760.0 /
!c2h5coc2h5+c2h5=c2h5coc2h4s+c2h6      6.000E+10    0.00    8600.0 !
Curran
!                                 rev /  1.105E+15   -0.89   18720.0 /
!c2h5coc2h5+ch3o=c2h5coc2h4s+ch3oh     2.900E+11    0.00    2771.0 !
Curran
!                                 rev /  6.298E+11   -0.30   14850.0 /
!c2h5coc2h5+ch3o2=c2h5coc2h4s+ch3o2h   4.000E+12    0.00   15250.0 !
Curran
!                                 rev /  1.903E+15   -0.83   12030.0 /

c2h5coc2h4s=c2h5coc2h3+h               8.704E+16   -0.82   42130.0 !
Curran
                                 rev /  1.300E+13    0.00    1560.0 /
c2h5coc2h4p=c2h5co+c2h4                1.548E+17   -1.46   27840.0 !
                                 rev / 7.000E+10    0.00    9600.0 /
c2h5coc2h4p+o2=c2h5coc2h4o2                9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c2h5coc2h4o2+ho2=c2h5coc2h4o2h+o2      2.290E+11    0.00   -1790.0 !
```

```
Atkinson et al., 2001
c2h5coc2h4o2h=c2h5coc2h4o+oh           1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
ch2o+c2h5coch2=c2h5coc2h4o                 1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te


!pentanone+h=h2+nc3h7coch2              2.700E+07    2.00    5000.0
! FCO 5414
!pentanone+oh=h2o+nc3h7coch2            7.800E+06    2.00    -765.0
! FCO 5415
!pentanone+ho2=h2o2+nc3h7coch2          1.200E+12    0.00   15500.0
! FCO 5416
!pentanone+ch3=ch4+nc3h7coch2           6.000E+11    0.00    9600.0
! FCO 5417
!pentanone+ch3o2=ch3o2h+nc3h7coch2      6.000E+11    0.00    9600.0
! FCO 5418
!pentanone+c2h5=c2h6+nc3h7coch2         6.000E+11    0.00   11000.0
! FCO 5419

!pentanone+h=h2+mvk+ch3                 2.700E+07    2.00    5000.0
! FCO 5414
!pentanone+oh=h2o+mvk+ch3               7.800E+06    2.00    -765.0
! FCO 5415
!pentanone+ho2=h2o2+mvk+ch3             1.200E+12    0.00   15500.0
! FCO 5416
!pentanone+ch3=ch4+mvk+ch3              6.000E+11    0.00    9600.0
! FCO 5417
!pentanone+ch3o2=ch3o2h+mvk+ch3         6.000E+11    0.00    9600.0
! FCO 5418
!pentanone+c2h5=c2h6+mvk+ch3            6.000E+11    0.00   11000.0
! FCO 5419


!nc3h7coch2=nc3h7+ch2co                 1.226E+18   -1.40   43450.0
!                                 rev /  1.000E+11    0.00   11600.0 /

!c3h6coch3-1=c2h4+ch2coch3              2.904E+16   -1.21   27000.0 !
Curran
!                                 rev / 1.000E+11    0.00    8600.0 /

!************************************
!**** c2h5coc2h4  ****
!************************************




!************************************
!**** Ethylvinylketone c2h5coc2h3 ****
!************************************

c2h5coc2h3=>c2h3+c2h5co                 7.940E+17    0.00   84456.0
! idem acetone mousavipour1996
c2h5coc2h3=>c2h3co+c2h5                 7.940E+17    0.00   84456.0
! idem acetone mousavipour1996

!c2h5coc2h3+ho2=c2h3coc2h4+h2o2         1.100E+11    0.00   17061.0
! idem c4h8
!c2h5coc2h3+oh=c2h3coc2h4+h2o           4.186E+06    2.00    -543.0
! idem c4h8
!c2h5coc2h3+o=c2h3coc2h4+oh             2.600E+12    0.00    4500.0
! idem c4h8
```

```
!c2h5coc2h3+h=c2h3coc2h4+h2             1.950E+13    0.00    4445.0
! idem c4h8
!c2h5coc2h3+ch3=c2h3coc2h4+ch4          1.000E+11    0.00   17061.0
! idem c4h8

c2h5coc2h3+oh=c2h5coch2+ch2o           1.000E+10    0.00       0.0 !
Curran
                                 rev /  1.673E+11   -0.39   18220.0 /
c2h5coc2h3+ho2=c2h5co+ch2hco+oh        6.030E+09    0.00    7949.0 !
Curran
                                 rev /  1.000E+00    0.00       0.0 /
c2h5coc2h3+ch3o2=c2h5co+ch2hco+ch3o    3.970E+11    0.00   17050.0 !
Curran
                                 rev /  1.000E+00    0.00       0.0 /
!
c2h5coc2h3+oh=pc2h4coc2h3+h2o          7.550E+09    0.97    1586.0 !
Curran
                                 rev /  1.285E+08    2.53   20210.0 /
c2h5coc2h3+ho2=pc2h4coc2h3+h2o2        2.380E+04    2.55   16490.0 !
Curran
                                 rev /  2.405E+03    3.78    3652.0 /
c2h5coc2h3+ch3o2=pc2h4coc2h3+ch3o2h    3.010E+12    0.00   19380.0 !
Curran
                                 rev /  1.250E+12    1.06    5822.0 /
c2h5coc2h3+o2=pc2h4coc2h3+ho2          2.050E+13    0.00   51310.0 !
Curran
c2h5coc2h3+h=pc2h4coc2h3+h2            9.160E+06    2.00    7700.0 !
Curran
c2h5coc2h3+c2h3=pc2h4coc2h3+c2h4       5.000E+11    0.00   10400.0 !
Curran
c2h5coc2h3+c2h5=pc2h4coc2h3+c2h6       5.000E+10    0.00   13400.0 !
Curran
c2h5coc2h3+ch3o=pc2h4coc2h3+ch3oh      2.170E+11    0.00    6460.0 !
Curran
!
c2h5coc2h3+oh=sc2h4coc2h3+h2o          8.450E+11    0.00    -228.0 !
Curran
                                 rev /  1.350E+13   -0.20   28600.0 /
c2h5coc2h3+ho2=sc2h4coc2h3+h2o2        2.000E+11    0.00    8698.0 !
Curran
                                 rev /  1.896E+13   -0.53    6065.0 /
c2h5coc2h3+ch3o2=sc2h4coc2h3+ch3o2h    2.000E+12    0.00   15250.0 !
Curran
                                 rev /  7.793E+14   -0.71   11900.0 /
c2h5coc2h3+o2=sc2h4coc2h3+ho2          1.550E+13    0.00   41970.0 !
Curran
c2h5coc2h3+h=sc2h4coc2h3+h2            4.480E+06    2.00    3200.0 !
Curran
c2h5coc2h3+c2h3=sc2h4coc2h3+c2h4       3.000E+11    0.00    5600.0 !
Curran
c2h5coc2h3+c2h5=sc2h4coc2h3+c2h6       3.000E+10    0.00    8600.0 !
Curran
c2h5coc2h3+ch3o=sc2h4coc2h3+ch3oh      1.450E+11    0.00    2771.0 !
Curran
!
pc2h4coc2h3=c2h3co+c2h4                5.263E+14    0.38   21460.0 !
Curran
                                 rev /  8.000E+10    0.00   11300.0 /
sc2h4coc2h3=ch3chco+c2h3               1.637E+16   -0.74   54590.0 !
Curran
                                 rev /  8.000E+10    0.00   12600.0 /


!****************************
```

```
!**** c2h3coc2h4 radical ****
!****************************

!!pc2h4coc2h3=c2h3co+c2h4               5.263E+14    0.38   21460.0
! Curran
!pc2h4coc2h3+oh=divinket+h2o           4.000E+13    0.00       0.0 !
idem c4h73+oh Yahyaoui
!pc2h4coc2h3+h=divinket+h2             3.160E+13    0.00       0.0 !
idem c4h73+h Yahyaoui
!pc2h4coc2h3+ho2=divinket+h2o2         1.800E+12    0.00       0.0 !
idem c4h73+ho2 Yahyaoui
!pc2h4coc2h3+ch3=divinket+ch4          7.940E+12    0.00       0.0 !
idem c4h731+ch3 Yahyaoui
!pc2h4coc2h3+o2=divinket+ho2           1.020E+12    0.00   22654.0 !
idem c4h73+o2 Yahyaoui
!pc2h4coc2h3=divinket+h                1.000E+14    0.00   44000.0 !
idem c4h73=c4h6+h Yahyaoui

!pc2h4coc2h3+o=c2h3co+ch3hco           2.000E+14    0.00       0.0 !
idem c5h7
!pc2h4coc2h3+ho2=c2h3co+ch3hco+oh      1.000E+13    0.00       0.0 !
idem phch2

!************************************
!**** Divinylketone DIVINKET ****
!************************************

c2h3+c2h3co=divinket                   3.120E+14   -0.50       0.0 !
idem c2h5+ch3co=butanone Tsang-hampson


!*****************************************
!**** Pent-2-én-4-yle radical Dc5h9-2 ****
!*****************************************

Dc5h9-2+h=c2c5h10                      1.000E+13    0.00       0.0 !
(RTI)
Dc5h9-2+h=t2c5h10                      1.000E+13    0.00       0.0 !
(RTI)
Dc5h9-2=c5h8-13+h                      1.200E+14    0.00   49300.0 !
(Cc4h7-1)
Dc5h9-2+o2=c5h8-13+ho2                 1.000E+11    0.00       0.0 !
(EST/Cc4h7-1+o2)
!Dc5h9-2+o2=>ch3co+tc3h5+oh            3.970E+12    0.00    -250.0 !
(ESTc2h3+o2)
Dc5h9-2+ho2=>ch3hco+sc3h5+oh           1.000E+13    0.00       0.0 !
(EST/RAD+ho2)
Dc5h9-2+h=c5h8-13+h2                   3.160E+12    0.00       0.0 !
(EST Cc4h7-1+h)
Dc5h9-2+ch3=c5h8-13+ch4                1.000E+13    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
Dc5h9-2+c2h3=c5h8-13+c2h4              4.000E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
Dc5h9-2+c2h5=c5h8-13+c2h6              4.000E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
Dc5h9-2+ac3h5=c5h8-13+c3h6             4.000E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
Dc5h9-2+Cc4h7-1=c5h8-13+c4h8           3.160E+12    0.00       0.0 !
(ESTImEE)

!*****************************************
!**** Pent-1-én-1-yle radical Ac5h9-1 ****
!*****************************************
```

```
Ac5h9-1=cyc5h8+h                        2.280E+11    0.00   18277.0 !
(16/09/2000 idem cyc6h10 DV)

Ac5h9-1+ho2=>nc3h7+ch2co+oh             5.000E+12    0.00    8000.0 !
(06/09/2000)

!Ec5h9-1=cyc5h8+h                        2.280E+11    0.00   18277.0 !
(16/09/2000 idem cyc6h10 DV)
Ec5h9-1=cyc5h8+h                        6.900E-03    0.00   -4213.0 !
Tsang 1992

!***********************************************
!**** 3-Butenyl, 2-methylene- radical isoph ****
!***********************************************

isoph=isope+h                           1.000E+14    0.00   44000.0 !
idem Dc4h7-1
isoph=c2h4+tc3h5                        5.000E+13    0.00   38000.0 !
idem Dc4h7-1

!***********************************************
!**** 3-Butenyl, 2-methylene- radical isope ****
!***********************************************

isope+ho2=isopy+h2o2                    2.000E+05    2.60   13910.0 !
(=c3h6/190995)
isope+oh=isopy+h2o                      2.000E+07    2.00    5000.0 !
(=c4h6)

!***********************************************
!**** 3-Butenyl, 2-methylene- radical isopy ****
!***********************************************

c4h4+ch3=isopy                          2.500E+13    0.00       0.0 !
(ESTImEE)
isopy=c2h3+ac3h4                        2.000E+13    0.00   48700.0 !
Dean

isopy+o2=ch2o+ch2coc2h3                 3.080E+09    0.37   16910.0 !
Lee

!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€        SOUS-mECANISmE C6
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! hexane c6h14 reactions
! global step : metathesis + direct decomposition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c6h14=nc3h7+nc3h7                       1.000E+17    0.00   86930.0
!
!c6h14=c2h5+pc4h9                        1.000E+17    0.00   84750.0
!
!c6h14=ch3+Ac5h11                        1.000E+17    0.00   87430.0
!
```

```
!c6h14=h+Ac6h13                          1.800E+16    0.00   98000.0
!
!c6h14=h+Bc6h13                          1.200E+16    0.00   98730.0
!
!c6h14=h+Cc6h13                          1.200E+16    0.00   98530.0
!

c6h14=nc3h7+nc3h7                       7.360E+28   -3.04   93270.0 !
estimated fron reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
c6h14=c2h5+pc4h9                        2.750E+29   -3.284  92039.0 !
estimated fron reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
c6h14=ch3+Ac5h11                        3.830E+24   -1.906  93137.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+13, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199

c6h14=h+Ac6h13                          7.930E+18   -0.373 104311.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
c6h14=h+Bc6h13                          1.140E+19   -0.431 102069.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
c6h14=h+Cc6h13                          1.370E+19   -0.449 102119.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199

c6h14+o2=ho2+Ac6h13                     4.000E+13   0.000   50870.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
c6h14+o2=ho2+Bc6h13                     8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
c6h14+o2=ho2+Cc6h13                     8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-


c6h14+oh=h2o+Ac6h13                     1.410E+07    1.80     973.7  !
mati
c6h14+oh=h2o+Bc6h13                     1.990E+06    2.00    -596.2  !
mati
c6h14+oh=h2o+Cc6h13                     2.250E+06    2.00   -1391.0  !
mati

c6h14+ho2=h2o2+Ac6h13                   3.600E+04    2.50   16683.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
c6h14+ho2=h2o2+Bc6h13                   4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
c6h14+ho2=h2o2+Cc6h13                   4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365


c6h14+h=h2+Ac6h13                       5.700E+07    2.00    7700.0  !
mE 2942 CW
c6h14+h=h2+Bc6h13                       1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2943 CW
c6h14+h=h2+Cc6h13                       1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2944 CW

o+c6h14=oh+Ac6h13                       1.000E+14    0.00    7850.0  !
mE 2937 CW
o+c6h14=oh+Bc6h13                       5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2938 CW
o+c6h14=oh+Cc6h13                       5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2939 CW
```

```
c6h14+ch3=ch4+Ac6h13                    6.000E-01    4.00    8200.0  !
mE 2957 CN
c6h14+ch3=ch4+Bc6h13                    4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2958 CN
c6h14+ch3=ch4+Cc6h13                    4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2959 CN

c6h14+c2h5=c2h6+Ac6h13                  6.000E+11    0.00   13500.0  !
mE 2992 CR
c6h14+c2h5=c2h6+Bc6h13                  4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2993 CN
c6h14+c2h5=c2h6+Cc6h13                  4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2994 CN

c6h14+hco=ch2o+Ac6h13                   2.000E+05    2.50   18500.0  !
mE 2962 CN
c6h14+hco=ch2o+Bc6h13                   2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2963 CN
c6h14+hco=ch2o+Cc6h13                   2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2964 CN

c6h14+ch3o=ch3oh+Ac6h13                 3.200E+11    0.00    7300.0  !
mE 2972 CN
c6h14+ch3o=ch3oh+Bc6h13                 2.900E+11    0.00    4500.0  !
mE 2973 CN
c6h14+ch3o=ch3oh+Cc6h13                 2.900E+11    0.00    4500.0  !
mE 2974 CN

c6h14+ch2oh=ch3oh+Ac6h13                2.000E+02    2.95   14000.0  !
mE 2967 CN
c6h14+ch2oh=ch3oh+Bc6h13                1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2968 CN
c6h14+ch2oh=ch3oh+Cc6h13                1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2969 CN

c6h14+ch3o2=ch3o2h+Ac6h13               1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 2977 CN
c6h14+ch3o2=ch3o2h+Bc6h13               6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2978 CN
c6h14+ch3o2=ch3o2h+Cc6h13               6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2979 CN

c6h14+ch2hco=ch3hco+Ac6h13              6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3002 CR
c6h14+ch2hco=ch3hco+Bc6h13              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3003 CR
c6h14+ch2hco=ch3hco+Cc6h13              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3004 CR

c6h14+ch3co=ch3hco+Ac6h13               3.000E+11    0.00   15000.0  !
mE 3007 CR
c6h14+ch3co=ch3hco+Bc6h13               2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3008 CR
c6h14+ch3co=ch3hco+Cc6h13               2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3009 CR

c6h14+nc3h7=c3h8+Ac6h13                 6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3032 CR
c6h14+nc3h7=c3h8+Bc6h13                 4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3033 CR
c6h14+nc3h7=c3h8+Cc6h13                 4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3034 CR
```

```
c6h14+pc4h9=c4h10+Ac6h13                6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3037 CR
c6h14+pc4h9=c4h10+Bc6h13                4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3038 CR
c6h14+pc4h9=c4h10+Cc6h13                4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3039 CR

c6h14+Ac5h11=nc5h12+Ac6h13              6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3042 CR
c6h14+Ac5h11=nc5h12+Bc6h13              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3043 CR
c6h14+Ac5h11=nc5h12+Cc6h13              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3044 CR

c6h14+Ac6h13=c6h14+Bc6h13               4.000E+11    0.00   11400.0 !
mE 3067 CR
c6h14+Ac6h13=c6h14+Cc6h13               4.000E+11    0.00   11400.0 !
mE 3068 CR
c6h14+Bc6h13=c6h14+Cc6h13               4.000E+11    0.00   12400.0 !
mE 3072 CR

c6h14+o2cho=Ac6h13+ho2cho               1.680E+13    0.00   20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
c6h14+o2cho=Bc6h13+ho2cho               1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
c6h14+o2cho=Cc6h13+ho2cho               1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004


!c6h14+c6h13qjA=c6h13qA+Ac6h13          1.200E+13    0.00   20000.0
! mE 3182 CN
!c6h14+c6h13qjA=c6h13qA+Bc6h13          6.000E+12    0.00   17500.0
! mE 3183 CN
!c6h14+c6h13qjA=c6h13qA+Cc6h13          6.000E+12    0.00   17500.0
! mE 3184 CN
!c6h14+c6h13qjB=c6h13qB+Ac6h13          1.200E+13    0.00   20000.0
! mE 3187 CN
!c6h14+c6h13qjB=c6h13qB+Bc6h13          6.000E+12    0.00   17500.0
! mE 3188 CN
!c6h14+c6h13qjB=c6h13qB+Cc6h13          6.000E+12    0.00   17500.0
! mE 3189 CN
!c6h14+c6h13qjC=c6h13qC+Ac6h13          1.200E+13    0.00   20000.0
! mE 3192 CN
!c6h14+c6h13qjC=c6h13qC+Bc6h13          6.000E+12    0.00   17500.0
! mE 3193 CN
!c6h14+c6h13qjC=c6h13qC+Cc6h13          6.000E+12    0.00   17500.0
! mE 3194 CN

!###############
!^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h13 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^
!###############

!*************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!*************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac6h13=pc4h9+c2h4                       1.020E+12    0.30   27276.0 !
Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148
Bc6h13=nc3h7+c3h6                       4.470E+11    0.57   28047.0 !
Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148
Cc6h13=c2h5+c4h8                        3.550E+12    0.29   28246.0 !
Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148
Cc6h13=ch3+c5h10                        8.130E+10    0.78   29651.0 !
Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148

!Ac6h13=pc4h9+c2h4                       2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1699 CW
!Bc6h13=nc3h7+c3h6                       2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1731 CW
!Cc6h13=c2h5+c4h8                        2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1727 CW
!Cc6h13=ch3+c5h10                        2.000E+13    0.00   31000.0
! DE 1728 CN


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!Ac6h13=h+c6h12-1    3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE 1700 CN
!Bc6h13=h+c6h12-2    3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE 1732 CN
!Bc6h13=h+c6h12-1    3.000E+13  0.00  39000.0  ! DE 1733 CN
!Cc6h13=h+c6h12-2    3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE 1729 CN
!Cc6h13=h+c6h12-3    3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE 1730 CN

Ac6h13=h+c6h12-1                        1.390E+16   -0.88   36837.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc6h13=h+c6h12-1                        1.630E+16   -0.82   37690.0 !
estimated from reverse constant k=4.24E+11.T^0.51.exp(-1230/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc6h13=h+c6h12-2                        8.760E+15   -1.19   37213.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc6h13=h+c6h12-2                        7.330E+15   -1.17   37163.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc6h13=h+c6h12-3                        7.330E+15   -1.17   37163.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac6h13+o2=c6h12-1+ho2    1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX 2572 CN
!Bc6h13+o2=c6h12-1+ho2    1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX 2589 CN
!Bc6h13+o2=c6h12-2+ho2    8.100E+11  0.00  5000.0  ! OX 2590 CN
!Cc6h13+o2=c6h12-2+ho2    1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX 2587 CN
!Cc6h13+o2=c6h12-3+ho2    1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX 2588 CN
Bc6h13+o2=c6h12-1+ho2                   1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Bc6h13+o2=c6h12-2+ho2                   1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc6h13+o2=c6h12-2+ho2                   1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc6h13+o2=c6h12-3+ho2                   1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac6h13=Bc6h13                   7.900E+10    0.00   12000.0  !
estimation selon Exgas
!Ac6h13=Cc6h13                   4.600E+11    0.00   17300.0  !
estimation selon Exgas

Ac6h13=Bc6h13                   9.886E+07    1.00   12000.0  !
                      rev / 1.483E+08    1.00   14500.0/
Ac6h13=Cc6h13                   3.346E+09    1.00   37000.0  !
!                      rev / 5.019E+08    1.00   39500.0/
DUPLICATE
Ac6h13=Cc6h13                   5.750E+08    1.00   17300.0  !
!                      rev / 8.625E+08    1.00   19800.0/
DUPLICATE
Bc6h13=Cc6h13                   3.346E+09    1.00   37000.0  !
!                      rev / 3.346E+09    1.00   37000.0/

!Ac6h13=Bc6h13                   1.820E+02    2.55   10961.0 ! Tsang
et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148
!                      rev / 1.700E+01    2.89   13380.0/
!Ac6h13=Cc6h13                   6.920E+00    3.20   16559.0 ! Tsang
et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148
!                      rev / 7.080E+00    3.23   18938.0/


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac6h13+o2=c6h13qjA                     4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!Bc6h13+o2=c6h13qjB                     1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Cc6h13+o2=c6h13qjC                     1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!Ac6h13+o2=c6h13qjA                     9.000E+18    -2.50       0.0
!
!Bc6h13+o2=c6h13qjB                     1.700E+19    -2.50       0.0
!
!Cc6h13+o2=c6h13qjC                     1.800E+19    -2.50       0.0
!

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) decomposition by O, O2 and hO2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac6h13+ho2=c6h13ojA+oh                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Bc6h13+ho2=c6h13ojB+oh                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Cc6h13+ho2=c6h13ojC+oh                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran

Ac6h13+ch3o2=c6h13ojA+ch3o              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Bc6h13+ch3o2=c6h13ojB+ch3o              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Cc6h13+ch3o2=c6h13ojC+ch3o              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran

Ac6h13+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o            7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Bc6h13+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o            7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Cc6h13+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o            7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran

Ac6h13+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Bc6h13+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Cc6h13+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran

Ac6h13+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Ac6h13+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Ac6h13+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Bc6h13+c6h13qjA=c6h13ojB+c6h13ojA       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Bc6h13+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Bc6h13+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Cc6h13+c6h13qjA=c6h13ojC+c6h13ojA       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Cc6h13+c6h13qjB=c6h13ojC+c6h13ojB       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran
Cc6h13+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h13qj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!***************************
! 1) isomerisation to QOOh
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c6h13qjA=c6h12rBqA                      3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjA=c6h12rCqA                      5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjA=c6h12rDqA                      9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjA=c6h12rEqA                      1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjB=c6h12rAqB                      5.030E+09    1.00   35500.0 !
5-member ring, 3 primary H atoms
c6h13qjB=c6h12rCqB                      3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjB=c6h12rDqB                      5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjB=c6h12rEqB                      9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjB=c6h12rFqB                      2.550E+07    1.00   24000.0 !
8-member ring, 3 primary H atoms

c6h13qjC=c6h12rAqC                      8.630E+08    1.00   28000.0 !
6-member ring, 3 primary H atoms
c6h13qjC=c6h12rBqC                      3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjC=c6h12rDqC                      3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjC=c6h12rEqC                      5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c6h13qjC=c6h12rFqC                      1.480E+08    1.00   25000.0 !
7-member ring, 3 primary H atoms


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c6h13qjA+ho2=c6h13qA+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c6h13qjB+ho2=c6h13qB+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c6h13qjC+ho2=c6h13qC+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran

c6h13qjA+ho2=c6h13ojA+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjB+ho2=c6h13ojB+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjC+ho2=c6h13ojC+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0

c6h13qjA+ch3o2=c6h13ojA+ch3o+o2         1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjB+ch3o2=c6h13ojB+ch3o+o2         1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjC+ch3o2=c6h13ojC+ch3o+o2         1.000E+11    0.00       0.0

c6h13qjA+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o+o2       1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjB+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o+o2       1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjC+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o+o2       1.000E+11    0.00       0.0

c6h13qjA+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o+o2     1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjB+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o+o2     1.000E+11    0.00       0.0
c6h13qjC+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o+o2     1.000E+11    0.00       0.0

c6h13qjA+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c6h13qjA+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c6h13qjA+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c6h13qjB+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c6h13qjB+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c6h13qjC+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC+o2      1.000E+11    0.00
0.0
```

```
!######################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h12rXqjY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!######################

!***************************
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
!***************************

!c6h12rDqA=c4h8+c2h4o2h                 2.000E+13    0.00   28700.0 !
!c6h12rEqA=c3h6+c3h6ooh1-3              2.000E+13    0.00   28700.0 !

!c6h12rEqB=c3h6+c3h6ooh2-1              2.000E+13    0.00   28700.0 !
!c6h12rFqB=c2h4+c4h8rDqB                2.000E+13    0.00   28700.0 !

!c6h12rFqC=c2h4+c4h8rAqB                2.000E+13    0.00   28700.0 !


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation
! c6h12rYqX=c6h12rZqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c6h12rBqA=c6h12rEqA                  5.700E+08    1.00   17300.0  !
IS 317 KB
!c6h12rBqA=c6h12rFqA                  1.500E+08    1.00   14500.0  !
IS 318 KB
!c6h12rCqA=c6h12rFqA                  8.600E+08    1.00   19800.0  !
IS 319 KB
!c6h12rDqA=c6h12rAqA                  5.700E+08    1.00   15300.0  !
IS 320 KB
!c6h12rEqA=c6h12rAqA                  9.900E+07    1.00   10000.0  !
IS 321 KB
!c6h12rFqA=c6h12rAqA                  1.700E+07    1.00   15400.0  !
IS 516 KB

!c6h12rAqB=c6h12rDqB                  5.700E+08    1.00   17300.0  !
IS 523 KB
!c6h12rAqB=c6h12rEqB                  9.900E+07    1.00   12000.0  !
IS 524 KB
!c6h12rAqB=c6h12rFqB                  2.500E+07    1.00   19900.0  !
IS 525 KB
!c6h12rCqB=c6h12rFqB                  8.600E+08    1.00   19800.0  !
IS 526 KB
!c6h12rEqB=c6h12rBqB                  2.900E+08    1.00   13300.0  !
IS 527 KB
!c6h12rFqB=c6h12rBqB                  4.900E+07    1.00    8000.0  !
IS 528 KB

!c6h12rBqC=>c6h12rEqC                 5.700E+08    1.00   17300.0  !
IS 517 KB
!c6h12rBqC=c6h12rFqC                  1.500E+08    1.00   14500.0  !
IS 518 KB
!c6h12rAqC=c6h12rDqC                  5.700E+08    1.00   17300.0  !
IS 519 KB
!c6h12rAqC=c6h12rEqC                  9.900E+07    1.00   12000.0  !
IS 520 KB
!c6h12rAqC=>c6h12rFqC                 2.500E+07    1.00   19900.0  !
IS 521 KB
!c6h12rFqC=c6h12rCqC                  2.900E+08    1.00   13300.0  !
IS 522 KB
!c6h12rEqC=>c6h12rBqC                 5.700E+08    1.00   17300.0  !
IS 517 KB
!c6h12rFqC=>c6h12rAqC                 2.500E+07    1.00   19900.0  !
IS 521 KB

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c6h12rYqX+o2=c6h12qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!c6h12rAqA+o2=c6h12qjAqA                1.840E+45  -11.10    6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!!c6h12rFqA+o2=c6h12qjFqA                4.820E+36   -8.23    5167.0
!DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

!c6h12rAqB+o2=c6h12qjAqB                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!!c6h12rBqB+o2=c6h12qjBqB                1.840E+45  -11.10    6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

!c6h12rAqC+o2=c6h12qjAqC                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!!c6h12rCqC+o2=c6h12qjCqC                1.840E+45  -11.10    6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c6h12rFqC+o2=c6h12qjFqC                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c6h12rAqB+o2=c6h12qjAqB                 9.000E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB                 9.000E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c6h12rAqC+o2=c6h12qjAqC                 9.000E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c6h12rFqC+o2=c6h12qjFqC                 9.000E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c6h12rAqC=>oh+c2h4+nc3h7hco             5.000E+13    0.00   25500.0  !
c6h12rCqA=>oh+ch2o+c5h10                5.000E+13    0.00   25500.0  !
c6h12rDqB=>oh+ch3hco+c4h8               5.000E+13    0.00   25500.0  !
c6h12rEqC=>oh+c3h6+ethco                5.000E+13    0.00   25500.0  !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
!   (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB                  1.400E+12    0.00   15900.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC                  2.040E+11    0.00   19500.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD                  3.600E+10    0.00   13050.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE                  1.500E+08    0.00    1800.0 !

!c6h12rAqB=oh+c6h12o-AB                  1.400E+12    0.00   15900.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC                  1.400E+12    0.00   15900.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rDqB=oh+c6h12o-BD                  2.040E+11    0.00   19500.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE                  3.600E+10    0.00   13050.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rFqB=oh+c6h12o-AE                  1.500E+08    0.00    1800.0 !

!c6h12rBqC=oh+c6h12o-BC                  1.400E+12    0.00   15900.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rAqC=oh+c6h12o-AC                  2.040E+11    0.00   19500.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rDqC=oh+c6h12o-CD                  1.400E+12    0.00   15900.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rEqC=oh+c6h12o-BD                  2.040E+11    0.00   19500.0 !
Wijaya 2003
!c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD                  3.600E+10    0.00   13050.0 !
Wijaya 2003

!c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE                  1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c6h12rAqB=oh+c6h12o-AB                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c6h12rDqB=oh+c6h12o-BD                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c6h12rFqB=oh+c6h12o-AE                  1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c6h12rBqC=oh+c6h12o-BC                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c6h12rAqC=oh+c6h12o-AC                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c6h12rDqC=oh+c6h12o-CD                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c6h12rEqC=oh+c6h12o-BD                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol

c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC                 9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD                 3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE                 1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c6h12rAqB=oh+c6h12o-AB                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
```

```
c6h12rDqB=oh+c6h12o-BD                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c6h12rFqB=oh+c6h12o-AE                1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c6h12rBqC=oh+c6h12o-BC                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c6h12rAqC=oh+c6h12o-AC                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c6h12rDqC=oh+c6h12o-CD                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c6h12rEqC=oh+c6h12o-BD                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
!    alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c6h12rBqA=ho2+c6h12-1                   8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1788 CR
!c6h12rAqB=ho2+c6h12-1                   8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1998 CR
!c6h12rBqC=ho2+c6h12-2                   8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1982 CR
!c6h12rCqB=ho2+c6h12-2                   8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 2000 CR
!c6h12rDqC=ho2+c6h12-3                   8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1988 CR

ho2+c6h12-1=c6h12rBqA                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c6h12-1=c6h12rAqB                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c6h12-2=c6h12rBqC                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c6h12-2=c6h12rCqB                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c6h12-3=c6h12rDqC                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran

!#####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h12qjXqY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#####################

!**************************
! ketohydroperoxides formation
!**************************

!c6h12qjBqA=oh+c6h11oAqB               3.350E+09    1.00   35500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms
!c6h12qjCqA=oh+c6h11oAqC               5.750E+08    1.00   28000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms
!c6h12qjDqA=oh+c6h11oAqD               9.890E+07    1.00   25000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms
!c6h12qjEqA=oh+c6h11oAqE               1.700E+07    1.00   24000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms

!c6h12qjAqB=oh+c6h11oBqA               1.675E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjCqB=oh+c6h11oBqC               1.675E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjDqB=oh+c6h11oBqD               2.875E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjEqB=oh+c6h11oBqE               4.945E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjFqB=oh+c6h11oBqF               8.495E+06    1.00   21000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom

!c6h12qjAqC=oh+c6h11oCqA               2.875E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjBqC=oh+c6h11oCqB               1.675E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjDqC=oh+c6h11oCqD               1.675E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjEqC=oh+c6h11oCqE               2.875E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom
!c6h12qjFqC=oh+c6h11oCqF               4.945E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom

!c6h12qjBqA=oh+c6h11oAqB               3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c6h12qjCqA=oh+c6h11oAqC               5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c6h12qjDqA=oh+c6h11oAqD               9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c6h12qjEqA=oh+c6h11oAqE               1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

!c6h12qjAqB=oh+c6h11oBqA               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjCqB=oh+c6h11oBqC               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjDqB=oh+c6h11oBqD               2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjEqB=oh+c6h11oBqE               4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjFqB=oh+c6h11oBqF               8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c6h12qjAqC=oh+c6h11oCqA               2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjBqC=oh+c6h11oCqB               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjDqC=oh+c6h11oCqD               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjEqC=oh+c6h11oCqE               2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c6h12qjFqC=oh+c6h11oCqF               4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c6h12qjBqA=oh+c6h11oAqB               3.350E+09    1.00   33500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c6h12qjCqA=oh+c6h11oAqC               5.750E+08    1.00   26000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c6h12qjDqA=oh+c6h11oAqD               9.890E+07    1.00   23000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c6h12qjEqA=oh+c6h11oAqE               1.700E+07    1.00   22000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol

c6h12qjAqB=oh+c6h11oBqA               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjCqB=oh+c6h11oBqC               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjDqB=oh+c6h11oBqD               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjEqB=oh+c6h11oBqE               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjFqB=oh+c6h11oBqF               8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-21000cal/mol

c6h12qjAqC=oh+c6h11oCqA               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjBqC=oh+c6h11oCqB               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjDqC=oh+c6h11oCqD               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjEqC=oh+c6h11oCqE               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c6h12qjFqC=oh+c6h11oCqF               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

!################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! nc6h13o2h REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!################################

!**************************
! hydroperoxydes decomposition
!**************************

c6h13qA=oh+c6h13ojA                   1.500E+16    0.00   42500.0 !
Curran
c6h13qB=oh+c6h13ojB                   1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c6h13qC=oh+c6h13ojC                   1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran

!################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h13oj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!################################

c6h13ojA=ch2o+Ac5h11                  7.170E+17   -1.33   15013.0 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-3457/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c6h13ojB=ch3hco+pc4h9                 4.180E+12    0.37   10821.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c6h13ojB=ch3+nc4h9hco                 7.000E+11    0.59   15365.0 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-9043/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c6h13ojC=ethco+nc3h7                  5.280E+12    0.43   10946.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c6h13ojC=c2h5+nc3h7hco                2.370E+16   -0.57   10837.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h11oq REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!********************************
! Ketohydroperoxide decomposition
!********************************

!c6h11oAqB=oh+hco+nc4h9hco            1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oAqC=oh+ch2hco+nc3h7hco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oAqD=oh+ethco+ch2ch2hco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oAqE=oh+ch3hco+c3h6cho-1        1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c6h11oBqA=oh+ch2o+nc4h9co            1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oBqC=oh+ch3co+nc3h7hco          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oBqD=oh+ethco+ch2coch3          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oBqE=oh+ch3hco+ch3coc2h4p       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oBqF=oh+ch2o+c3h6coch3-1        1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c6h11oCqA=oh+ch2o+nc3h7coch2         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oCqB=oh+ch3hco+c3h7co           1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oCqD=oh+ethco+c2h5co            1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oCqE=oh+ch3hco+c2h5coch2        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c6h11oCqF=oh+ch2o+c2h5coc2h4p        1.000E+16    0.00   44500.0 !

c6h11oAqB=oh+hco+nc4h9hco            1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oAqC=oh+ch2hco+nc3h7hco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oAqD=oh+ethco+ch2ch2hco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oAqE=oh+ch3hco+c3h6cho-1        1.500E+16    0.00   44500.0 !

c6h11oBqA=oh+ch2o+nc4h9co            1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oBqC=oh+ch3co+nc3h7hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oBqD=oh+ethco+ch2coch3          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oBqE=oh+ch3hco+ch3coc2h4p       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oBqF=oh+ch2o+c3h6coch3-1        1.500E+16    0.00   44500.0 !

c6h11oCqA=oh+ch2o+nc3h7coch2         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oCqB=oh+ch3hco+c3h7co           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oCqD=oh+ethco+c2h5co            1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oCqE=oh+ch3hco+c2h5coch2        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c6h11oCqF=oh+ch2o+c2h5coc2h4p        1.500E+16    0.00   44500.0 !


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h12o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

!********************************
! o-ring decomposition
!********************************

c6h12o-AB+h=>h2+acrol+nc3h7           4.800E+08    1.50    2785.0 !
c6h12o-AB+oh=>h2o+acrol+nc3h7         2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AB+ho2=>h2o2+acrol+nc3h7       2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-AB+h=>h2+ch2co+pc4h9           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-AB+oh=>h2o+ch2co+pc4h9         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+pc4h9       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-BC+h=>h2+mvk+c2h5              2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-BC+oh=>h2o+mvk+c2h5            1.200E+06    2.00   -1192.0 !
```

```
c6h12o-BC+ho2=>h2o2+mvk+c2h5           1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-BC+h=>h2+ch3chco+nc3h7          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-BC+oh=>h2o+ch3chco+nc3h7        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+nc3h7      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-CD+h=>h2+ch3+c2h5coc2h3         4.800E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h5coc2h3       2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h5coc2h3     2.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-AC+h=>h2+c5h10+hco              4.800E+08    1.50    2785.0 !
c6h12o-AC+oh=>h2o+c5h10+hco            2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c5h10+hco          2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-AC+h=>h2+c2h4+c3h7co            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-AC+oh=>h2o+c2h4+c3h7co          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c3h7co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-BD+h=>h2+c4h8+ch3co             2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-BD+oh=>h2o+c4h8+ch3co           1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c4h8+ch3co         1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-BD+h=>h2+c3h6+c2h5co            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-BD+oh=>h2o+c3h6+c2h5co          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-AD+h=>h2+c4h8+ch2hco            4.800E+08    1.50    2785.0 !
c6h12o-AD+oh=>h2o+c4h8+ch2hco          2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c4h8+ch2hco        2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-AD+h=>h2+c2h4+c2h5coch2         2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-AD+oh=>h2o+c2h4+c2h5coch2       1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coch2     1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-BE+h=>h2+c3h6+ch2coch3          4.800E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-BE+oh=>h2o+c3h6+ch2coch3        2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2coch3      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-AE+h=>h2+c3h6+ch2ch2hco         4.800E+08    1.50    2785.0 !
c6h12o-AE+oh=>h2o+c3h6+ch2ch2hco       2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2ch2hco     2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c6h12o-AE+h=>h2+c2h4+ch3coc2h4p        2.400E+08    1.50    2005.0 !
c6h12o-AE+oh=>h2o+c2h4+ch3coc2h4p      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+ch3coc2h4p    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h12-1 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################
```

```
!*******************************
! 1) addition of h and ch3
! 2) addition of Oh
! 3) addition of O
! 4) addition of ho2
! 5) decomposition by R
!*******************************

c6h12-1=nc3h7+ac3h5                     2.500E+16    0.00   70000.0
! Yahyaoui
c2h3+pc4h9=c6h12-1                      1.000E+13    0.00       0.0
! Yahyaoui
c6h12-1=c3h6+c3h6                       4.000E+12    0.00   57430.0
! Yahyaoui

Cc6h11-1+h=c6h12-1                      1.000E+13    0.00       0.0
! Yahyaoui

c6h12-1=Dc4h7-1+c2h5                  1.310E+23   -1.91   87446.0 !
estimated from reverse constant k=8E+12
c6h12-1=Ec5h9-1+ch3                    9.650E+21   -1.48   89648.0 !
estimated from reverse constant k=1E+13


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition of oh, o
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c6h12-1+oh=Ac5h11+ch2o                  1.000E+11    0.00   -4000.0
! Yahyaoui

c6h12-1+o=Ac5h11+hco                    1.000E+11    0.00   -1050.0
! Yahyaoui

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) metathesis
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c6h12-1+o2=Cc6h11-1+ho2                 4.000E+12    0.00   40000.0
! Yahyaoui 2005
c6h12-1+ho2=h2o2+Cc6h11-1               6.800E+03    2.50   10115.0
! Scott and Walker 2002
c6h12-1+o=oh+Cc6h11-1                   4.000E+13    0.00    4000.0
! Yahyaoui
c6h12-1+h=h2+Cc6h11-1                   6.550E+12    0.00    4445.0
! Yahyaoui
c6h12-1+oh=h2o+Cc6h11-1                 4.186E+06    2.00    -543.0
! idem c4h8
c6h12-1+ch3=ch4+Cc6h11-1                2.000E+11    0.00    6800.0
! Yahyaoui
c6h12-1+c2h3=c2h4+Cc6h11-1              2.000E+11    0.00    6800.0
! Yahyaoui
c6h12-1+nc3h7=c3h8+Cc6h11-1             1.000E+11    0.00    8300.0
! Yahyaoui


!c6h12-1+oh=h2o+ch3+c5h8-14              6.350E+06    2.00    -500.0
! Yahyaoui 2005
c6h12-1+oh=h2o+ch3+c5h8-14              1.125E+06    2.00   -1391.0
! idem alkanes
!c6h12-1+ho2=h2o2+ch3+c5h8-14            6.800E+12    0.00   17000.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+ch3=ch4+ch3+c5h8-14             6.600E+11    0.00   10120.0
```

```
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+h=h2+ch3+c5h8-14                9.100E+06    2.00    5000.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+o=oh+ch3+c5h8-14                2.250E+03    3.30    1653.0
! Yahyaoui 2005

!c6h12-1+oh=h2o+ac3h5+c3h6               6.350E+06    2.00    -500.0
! Yahyaoui 2005
c6h12-1+oh=h2o+ac3h5+c3h6              1.000E+06    2.00    -597.0
! idem alkanes
!c6h12-1+ho2=h2o2+ac3h5+c3h6             6.800E+12    0.00   17000.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+ch3=ch4+ac3h5+c3h6              6.600E+11    0.00   10120.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+h=h2+ac3h5+c3h6                 9.100E+06    2.00    5000.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+o=oh+ac3h5+c3h6                 2.250E+03    3.30    1653.0
! Yahyaoui 2005

c6h12-1+o2=ho2+Fc6h11-1                2.100E+13    0.00   51300.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+oh=h2o+Fc6h11-1                 2.850E+05    2.30     236.0
! Yahyaoui 2005
c6h12-1+oh=h2o+Fc6h11-1                7.050E+06    1.80     974.0
! idem alkanes
!c6h12-1+ho2=h2o2+Fc6h11-1               5.600E+12    0.00   19400.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+ch3=ch4+Fc6h11-1                1.470E+12    0.00   11722.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+h=h2+Fc6h11-1                   2.800E+07    2.00    7700.0
! Yahyaoui 2005
!c6h12-1+o=oh+Fc6h11-1                   4.150E+02    3.50    3092.0
! Yahyaoui 2005


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h12-2 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

c6h12-2+o2=Cc6h11-1+ho2                1.950E+12    0.00   39000.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5
c6h12-2+ho2=Cc6h11-1+h2o2              1.500E+11    0.00   14190.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5
c6h12-2+oh=Cc6h11-1+h2o                7.698E+05    2.214    622.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5
c6h12-2+o=Cc6h11-1+oh                  1.750E+11    0.70    5884.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5
c6h12-2+h=Cc6h11-1+h2                  6.457E+12    0.00    4445.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5
c6h12-2+ch3=Cc6h11-1+ch4               1.600E+11    0.00    8800.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5
c6h12-2+c2h5=Cc6h11-1+c2h6             1.000E+11    0.00    9800.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5
c6h12-2+c2h3=Cc6h11-1+c2h4             2.210E+00    3.50    4682.0 !
idem c3h6+R=Rh+ac3h5

c6h12-2+ho2=h2o2+Bc6h11-3                1.000E+11    0.00   17060.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1
c6h12-2+o=oh+Bc6h11-3                    4.000E+13    0.00    4000.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1
c6h12-2+h=h2+Bc6h11-3                    6.550E+12    0.00    4445.0
```

```
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1
c6h12-2+oh=h2o+Bc6h11-3                  4.186E+06    2.00    -543.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1
c6h12-2+ch3=ch4+Bc6h11-3                 2.000E+11    0.00    6800.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1
c6h12-2+c2h3=c2h4+Bc6h11-3               2.000E+11    0.00    6800.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1
c6h12-2+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3              2.000E+11    0.00    8300.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c6h12-3 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

c6h12-3+ho2=h2o2+Bc6h11-3                2.000E+11    0.00   17060.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 *2
c6h12-3+o=oh+Bc6h11-3                    8.000E+13    0.00    4000.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 *2
c6h12-3+h=h2+Bc6h11-3                    1.310E+13    0.00    4445.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 *2
c6h12-3+oh=h2o+Bc6h11-3                  8.372E+06    2.00    -543.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 *2
c6h12-3+ch3=ch4+Bc6h11-3                 4.000E+11    0.00    6800.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 *2
c6h12-3+c2h3=c2h4+Bc6h11-3               4.000E+11    0.00    6800.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 *2
c6h12-3+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3              4.000E+11    0.00    8300.0
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 *2


!##########################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! Radical hexényl REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##########################

Fc6h11-1=Cc6h11-1                      1.000E+12    0.00   29880.0 !
Yahyaoui

Cc6h11-1=c2h5+c4h6                     4.000E+10    0.00   38250.0 !
Yahyaoui
Cc6h11-1=c5h8-13+ch3                   1.000E+12    0.00   50000.0 !
Yahyaoui
Cc6h11-1+ho2=>nc3h7+acrol+oh           1.000E+12    0.00    8000.0 !
Yahyaoui

Fc6h11-1=c2h4+Dc4h7-1                  1.000E+12    0.00   35000.0 !
Yahyaoui


Fc6h11-1=cyc6h11                       1.000E+08    0.86    5900.0 !
matheu

c2h4+Ac4h7-1=Ac6h11-3                  2.000E+11    0.00    2010.0 !
Addition of vinyl rad to terminal c of c=c
                                                                    !
Analogy with c2h4+c2h3 from Weissman and Benson IJCK (1989), Benson
says Ea is lower limit

Bc6h11-3=c5h8-13+ch3                   2.000E+13    0.00  42320.0 !
```

```
!###################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! hexa-1,5-diene c6h10-15 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################################

ac3h5+ac3h5=c6h10-15                    1.020E+13     0.00   -263.0 !
(TULLOCh 82)
Cc4h7-1+c2h3=c6h10-15                   1.000E+12     0.00      0.0 !
(SChARFE 85)

c6h10-15+o2=c6h9+ho2                    1.000E+11     0.00  25050.0 !
(STOThARD/WAL92)
c6h10-15+ho2=c6h9+h2o2                  1.636E+11     0.00  12583.0 !
(EST/WALKER77)
c6h10-15+oh=c6h9+h2o                    5.600E+12     0.00    861.0 !
(EST/WALKER77)
c6h10-15+h=c6h9+h2                      1.000E+14     0.00   3900.0 !
(SChARFE 85)
c6h10-15+ch3=c6h9+ch4                   2.500E+11     0.00   8300.0 !
(SChARFE 85)
c6h10-15+c2h5=c6h9+c2h6                 1.000E+11     0.00   8300.0 !
(SChARFE 85)
c6h10-15+c2h3=c6h9+c2h4                 6.300E+12     0.00  13000.0 !
(SChARFE 85)
c6h10-15+ac3h5=c6h9+c3h6                1.000E+12     0.00  10500.0 !
(SChARFE 85)

!###################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! hexa-1,3-diene c6h10-13 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################################

!c6h10-13=>c4h6+c2h4                      2.066E+13    0.44   38219.3
!c6h10-13=>c2h4+c2h2+c2h4                 2.066E+13    0.44   38219.3

c6h10-13=c2h2+c4h8                       1.000E+14    0.00   75000.0 !
Yahyaoui

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! hexanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

c5h11hco+h=h2+c5h11co                   4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5347
c5h11hco+oh=h2o+c5h11co                 4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5348
c5h11hco+ho2=h2o2+c5h11co               1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5349
c5h11hco+ch3=ch4+c5h11co                2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5350
c5h11hco+c2h5=c2h6+c5h11co              1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5351

c5h11co+M=co+Ac5h11+M                   8.640E+15    0.00   14400.0 !
c5h11co+ho2=>co2+oh+Ac5h11              2.000E+13    0.00       0.0  !

!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! hexanone REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
```

```
!###################

!hexanone+h=>h2+ch2co+c2h5+c2h4         2.700E+07    2.00    5000.0
! FCO 5420
!hexanone+oh=>h2o+ch2co+c2h5+c2h4       7.800E+06    2.00    -765.0
! FCO 5421
!hexanone+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+c2h4     1.200E+12    0.00   15500.0
! FCO 5422
!hexanone+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+c2h4      6.000E+11    0.00    9600.0
! FCO 5423
!hexanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+c2h4 6.000E+11    0.00    9600.0
! FCO 5424
!hexanone+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+c2h4    6.000E+11    0.00   11000.0
! FCO 5425

hexanone+h=>h2+ch2co+pc4h9             2.700E+07    2.00    5000.0  !
FCO 5420
hexanone+oh=>h2o+ch2co+pc4h9           7.800E+06    2.00    -765.0  !
FCO 5421
hexanone+ho2=>h2o2+ch2co+pc4h9         1.200E+12    0.00   15500.0  !
FCO 5422
hexanone+ch3=>ch4+ch2co+pc4h9          6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5423
hexanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+pc4h9     6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5424
hexanone+c2h5=>c2h6+ch2co+pc4h9        6.000E+11    0.00   11000.0  !
FCO 5425


!***********************************************
! Lc6h7 hexa-1,3,5-trien-1-yle radical reactions
!***********************************************

c6h7C=Lc6h7                            2.500E+14    0.70   41800.0 !
Weisman

Lc6h7=c2h2+nc4h5                       3.160E+13    0.00   43100.0 !
Dean
Lc6h7=Lc6h6+h                          3.980E+12    0.00   36500.0 !
Dean
Lc6h7+oh=Lc6h6+h2o                     2.000E+07    2.00    1000.0 !
miller idem nc4h5
Lc6h7+h=Lc6h6+h2                       2.000E+07    2.00    1000.0 !
miller idem nc4h5
Lc6h7+o2=chocho+nc4h5                  1.000E+12    0.00       0.0 !
miller idem nc4h5
Lc6h7+o2=Lc6h6+ho2                     1.000E+07    2.00   10000.0 !
miller idem nc4h5

!***********************************************
! Lc6h6 reactions
!***********************************************

Lc6h6+o2=>acrol+hco+c2h                2.000E+08    1.50   30200.0 !

!*************************************************
! U-c6h5 hexa-1,3-dien-5-yn-1-yl radical reactions
!*************************************************

c6h5=U-c6h5                            3.000E+13    0.00   72896.7 !
OK
U-c6h5=c2h2+nc4h3                      3.160E+13    0.00   43100.0 !
Dean
U-c6h5=Lc6h4+h                         3.980E+12    0.00   36500.0 !
```

```
Dean

!************************************
! Lc6h4 hexa-3-en-1,5-diyne reactions
!************************************

Lc6h4+o2=>2hco+2c2h                     2.000E+08    1.50   30200.0 !


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€        SOUS-mECANISmE C7
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!nc7h16=h+Ac7h15        1.340E+88 -21.17  1.428E+05
!nc7h16=h+Bc7h15        6.500E+87 -21.01  1.395E+05
!nc7h16=h+Cc7h15        6.500E+87 -21.01  1.395E+05
!nc7h16=h+Dc7h15        3.250E+87 -21.01  1.395E+05

!nc7h16=Ac6h13+ch3      2.925E+73 -16.61  1.189E+05
!nc7h16=Ac5h11+c2h5     8.100E+77 -17.62  1.204E+05
!nc7h16=pc4h9+nc3h7     1.415E+78 -17.71  1.207E+05

nc7h16=nc3h7+pc4h9                       1.220E+27   -3.00   89757.5 !
estimated fron reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=c2h5+Ac5h11                       4.490E+25   -2.58   88135.0 !
estimated fron reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=ch3+Ac6h13                        5.270E+22   -1.79   89834.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+13, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199

nc7h16=h+Ac7h15                          1.070E+17   -0.255 101045.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=h+Bc7h15                          1.600E+17   -0.318  98008.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=h+Cc7h15                          2.025E+17   -0.347  98866.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=h+Dc7h15                          1.030E+17   -0.347  98868.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199

!**************************
! Bimolecular initiation
!
!nc7h16+o2=ho2+c10h21
!**************************

nc7h16+o2=Ac7h15+ho2                 4.000E+13   0.000   50870.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc7h16+o2=Bc7h15+ho2                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc7h16+o2=Cc7h15+ho2                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
```

```
nc7h16+o2=Dc7h15+ho2                 4.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-


!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! heptane nc7h16 reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

nc7h16+oh=h2o+Ac7h15                 1.410E+07    1.80     973.7  !
mati
nc7h16+oh=h2o+Bc7h15                 1.990E+06    2.00    -596.2  !
mati
nc7h16+oh=h2o+Cc7h15                 2.250E+06    2.00   -1391.0  !
mati
nc7h16+oh=h2o+Dc7h15                 1.125E+06    2.00   -1391.0  !
mati

nc7h16+ho2=h2o2+Ac7h15                   3.600E+04    2.50   16683.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc7h16+ho2=h2o2+Bc7h15                   4.000E+04    2.50   14208.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc7h16+ho2=h2o2+Cc7h15                   4.000E+04    2.50   14208.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc7h16+ho2=h2o2+Dc7h15                   2.000E+04    2.50   14208.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365

nc7h16+h=h2+Ac7h15                   5.700E+07    2.00    7700.0  !
mE 2942 CW
nc7h16+h=h2+Bc7h15                   1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2943 CW
nc7h16+h=h2+Cc7h15                   1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2944 CW
nc7h16+h=h2+Dc7h15                   0.900E+07    2.00    5000.0  !
mE 2945 CW

o+nc7h16=oh+Ac7h15                   1.000E+14    0.00    7850.0  !
mE 2937 CW
o+nc7h16=oh+Bc7h15                   5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2938 CW
o+nc7h16=oh+Cc7h15                   5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2939 CW
o+nc7h16=oh+Dc7h15                   2.600E+13    0.00    5200.0  !
mE 2940 CW

nc7h16+ch3=ch4+Ac7h15                6.000E-01    4.00    8200.0  !
mE 2957 CN
nc7h16+ch3=ch4+Bc7h15                4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2958 CN
nc7h16+ch3=ch4+Cc7h15                4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2959 CN
nc7h16+ch3=ch4+Dc7h15                2.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2960 CN

nc7h16+c2h5=c2h6+Ac7h15              6.000E+11    0.00   13500.0  !
mE 2992 CR
nc7h16+c2h5=c2h6+Bc7h15              4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2993 CN
nc7h16+c2h5=c2h6+Cc7h15              4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2994 CN
nc7h16+c2h5=c2h6+Dc7h15              2.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2995 CN

nc7h16+hco=ch2o+Ac7h15               2.000E+05    2.50   18500.0  !
mE 2962 CN
```

```
nc7h16+hco=ch2o+Bc7h15                2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2963 CN
nc7h16+hco=ch2o+Cc7h15                2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2964 CN
nc7h16+hco=ch2o+Dc7h15                1.100E+07    1.90   17000.0  !
mE 2965 CN

nc7h16+ch3o=ch3oh+Ac7h15              3.200E+11    0.00   7300.0  ! mE
2972 CN
nc7h16+ch3o=ch3oh+Bc7h15              2.900E+11    0.00   4500.0  ! mE
2973 CN
nc7h16+ch3o=ch3oh+Cc7h15              2.900E+11    0.00   4500.0  ! mE
2974 CN
nc7h16+ch3o=ch3oh+Dc7h15              1.450E+11    0.00   4500.0  ! mE
2975 CN

nc7h16+ch2oh=ch3oh+Ac7h15             2.000E+02    2.95   14000.0  !
mE 2967 CN
nc7h16+ch2oh=ch3oh+Bc7h15             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2968 CN
nc7h16+ch2oh=ch3oh+Cc7h15             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2969 CN
nc7h16+ch2oh=ch3oh+Dc7h15             0.600E+02    2.95   12000.0  !
mE 2970 CN

nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Ac7h15            1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 2977 CN
nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Bc7h15            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2978 CN
nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Cc7h15            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2979 CN
nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Dc7h15            3.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2980 CN

nc7h16+ch2hco=ch3hco+Ac7h15           6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3002 CR
nc7h16+ch2hco=ch3hco+Bc7h15           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3003 CR
nc7h16+ch2hco=ch3hco+Cc7h15           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3004 CR
nc7h16+ch2hco=ch3hco+Dc7h15           2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3005 CR

nc7h16+ch3co=ch3hco+Ac7h15            3.000E+11    0.00   15000.0  !
mE 3007 CR
nc7h16+ch3co=ch3hco+Bc7h15            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3008 CR
nc7h16+ch3co=ch3hco+Cc7h15            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3009 CR
nc7h16+ch3co=ch3hco+Dc7h15            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3010 CR

nc7h16+nc3h7=c3h8+Ac7h15              6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3032 CR
nc7h16+nc3h7=c3h8+Bc7h15              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3033 CR
nc7h16+nc3h7=c3h8+Cc7h15              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3034 CR
nc7h16+nc3h7=c3h8+Dc7h15              2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3035 CR

nc7h16+pc4h9=c4h10+Ac7h15             6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3037 CR
nc7h16+pc4h9=c4h10+Bc7h15             4.000E+11    0.00   11400.0  !
```

```
mE 3038 CR
nc7h16+pc4h9=c4h10+Cc7h15             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3039 CR
nc7h16+pc4h9=c4h10+Dc7h15             2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3040 CR

nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Ac7h15            6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3042 CR
nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Bc7h15            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3043 CR
nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Cc7h15            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3044 CR
nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Dc7h15            2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3045 CR

nc7h16+Ac6h13=c6h14+Ac7h15            6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3047 CR
nc7h16+Ac6h13=c6h14+Bc7h15            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3048 CR
nc7h16+Ac6h13=c6h14+Cc7h15            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3049 CR
nc7h16+Ac6h13=c6h14+Dc7h15            2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3050 CR

nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Bc7h15            4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3383 CR
nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Cc7h15            4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3384 CR
nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Dc7h15            2.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3385 CR

nc7h16+Bc7h15=nc7h16+Cc7h15            4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3384 CR
nc7h16+Bc7h15=nc7h16+Dc7h15            2.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3385 CR

nc7h16+Cc7h15=nc7h16+Dc7h15            2.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3385 CR
rev / 2.000E+11    0.00   12400.0 /

nc7h16+o2cho=Ac7h15+ho2cho              1.680E+13    0.00   20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc7h16+o2cho=Bc7h15+ho2cho              1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc7h16+o2cho=Cc7h15+ho2cho              1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc7h16+o2cho=Dc7h15+ho2cho              5.600E+12    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h15 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

!**************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!**************************
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!Ac7h15=Ac5h11+c2h4                      2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1701 CW
!!Bc7h15=pc4h9+c3h6                       2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1740 CW
!!Cc7h15=nc3h7+c4h8                       2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1736 CW
!!Cc7h15=ch3+c6h12-1                      2.000E+13    0.00   31000.0
! DE 1737 CN
!!Dc7h15=c2h5+c5h10                       4.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1734 CW

Ac7h15=Ac5h11+c2h4                     9.120E+11    0.31   27240.5 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Bc7h15=pc4h9+c3h6                      6.025E+10    0.84   27823.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Cc7h15=nc3h7+c4h8                      5.495E+11    0.55   28087.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Cc7h15=ch3+c6h12-1                     9.550E+09    1.08   29391.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Dc7h15=c2h5+c5h10                      1.700E+10    1.11   27026.0 !
*2 High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-
138


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac7h15=h+c7h14-1                       3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1702 CN
Bc7h15=h+c7h14-1                       3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1741 CN
Bc7h15=h+c7h14-2                       3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1741 CN
Cc7h15=h+c7h14-2                       3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1738 CN
Cc7h15=h+c7h14-3                       3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1738 CN
Dc7h15=h+c7h14-3                       6.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1735 CN

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac7h15+o2=c7h14-1+ho2                  1.900E+12    0.00    5000.0 !
!Bc7h15+o2=c7h14-1+ho2                  8.000E+11    0.00    5000.0 !
!Bc7h15+o2=c7h14-2+ho2                  1.900E+12    0.00    5000.0 !
!Cc7h15+o2=c7h14-2+ho2                  1.900E+12    0.00    5000.0 !
!Cc7h15+o2=c7h14-3+ho2                  1.900E+12    0.00    5000.0 !
!Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2                  3.800E+12    0.00    5000.0 !
Bc7h15+o2=c7h14-1+ho2                   1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Bc7h15+o2=c7h14-2+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc7h15+o2=c7h14-2+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc7h15+o2=c7h14-3+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
```

```
idem sc4h9 Pitz 1988


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac7h15=Bc7h15                            3.900E+07    0.90   18452.4
!                                     rev/ 1.120E+07    1.10   19748.8 /
!Ac7h15=Cc7h15                            9.200E+07    1.02   12916.1
!                                     rev/ 6.160E+07    1.11   14340.1 /
!Ac7h15=Dc7h15                            8.700E+08    0.95   18290.0
!                                     rev/ 1.150E+09    1.04   19711.5 /
!
!Bc7h15=Cc7h15                            3.790E+08    1.05   18937.4
!                                     rev/ 8.730E+08    0.95   19062.6 /
!Bc7h15=Dc7h15                            2.200E+09    1.05   38637.4
!                                     rev/ 1.020E+10    0.95   38762.6 /

Ac7h15=Bc7h15                            2.951E+00    3.08   11017.0 !
Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                     rev/ 3.311E+00    3.11   13073.0 /
Ac7h15=Cc7h15                            2.291E+01    2.82   10757.0 !
Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                     rev/ 1.862E+00    3.16   12849.0 /
Ac7h15=Dc7h15                            5.130E+00    3.23   16849.0 !
Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                     rev/ 8.340E-01    3.57   18942.0 /

Bc7h15=Cc7h15                            1.412E+00    3.32   16146.0 !
Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                     rev/ 1.412E+00    3.32   16146.0 /

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!


!Ac7h15+o2=c7h15qjA                      9.000E+18    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!Bc7h15+o2=c7h15qjB                      1.700E+19    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!Cc7h15+o2=c7h15qjC                      1.800E+19    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Dc7h15+o2=c7h15qjD                      1.800E+19    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

!Ac7h15+o2=c7h15qjA                      4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!Bc7h15+o2=c7h15qjB                      1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Cc7h15+o2=c7h15qjC                      1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Dc7h15+o2=c7h15qjD                      1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) Alkoxy formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac7h15+ho2=c7h15ojA+oh                7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+ho2=c7h15ojB+oh                7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
```

```
Cc7h15+ho2=c7h15ojC+oh              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+ho2=c7h15ojD+oh              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+ch3o2=c7h15ojA+ch3o          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+ch3o2=c7h15ojB+ch3o          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+ch3o2=c7h15ojC+ch3o          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+ch3o2=c7h15ojD+ch3o          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+c2h5o2=c7h15ojA+c2h5o        7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+c2h5o2=c7h15ojB+c2h5o        7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+c2h5o2=c7h15ojC+c2h5o        7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+c2h5o2=c7h15ojD+c2h5o        7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+nc3h7o2=c7h15ojA+nc3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+nc3h7o2=c7h15ojB+nc3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+nc3h7o2=c7h15ojC+nc3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+nc3h7o2=c7h15ojD+nc3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+ic3h7o2=c7h15ojA+ic3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+ic3h7o2=c7h15ojB+ic3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+ic3h7o2=c7h15ojC+ic3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+ic3h7o2=c7h15ojD+ic3h7o      7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+c7h15qjA=2c7h15ojA              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+c7h15qjA=c7h15ojB+c7h15ojA     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+c7h15qjA=c7h15ojC+c7h15ojA     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+c7h15qjA=c7h15ojD+c7h15ojA     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+c7h15qjB=c7h15ojA+c7h15ojB     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+c7h15qjB=2c7h15ojB              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+c7h15qjB=c7h15ojC+c7h15ojB     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+c7h15qjB=c7h15ojD+c7h15ojB     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+c7h15qjC=c7h15ojA+c7h15ojC     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+c7h15qjC=c7h15ojB+c7h15ojC     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+c7h15qjC=2c7h15ojC              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
```

```
Curran 2002
Dc7h15+c7h15qjC=c7h15ojD+c7h15ojC     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac7h15+c7h15qjD=c7h15ojA+c7h15ojD     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc7h15+c7h15qjD=c7h15ojB+c7h15ojD     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc7h15+c7h15qjD=c7h15ojC+c7h15ojD     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc7h15+c7h15qjD=2c7h15ojD              7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h15oj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!**************************
! decomposition
! c10h21oj=aldehyde+alkyle
!**************************

!c7h15ojA=ch2o+Ac6h13                    1.000E+15    0.00   21600.0 !
!c7h15ojB=ch3hco+Ac5h11                  7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c7h15ojB=ch3+c5h11hco                   7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c7h15ojC=ethco+pc4h9                    7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c7h15ojC=c2h5+nc4h9hco                  7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c7h15ojD=nc3h7+nc3h7hco                 1.600E+15    0.00   15300.0 !

c7h15ojA=ch2o+Ac6h13                    4.720E+19   -1.86   14898.5 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-3457/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c7h15ojB=ch3hco+Ac5h11                  8.060E+09    1.21    9903.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c7h15ojB=ch3+c5h11hco                   5.100E+11    0.64   15328.0 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-9043/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c7h15ojC=ethco+pc4h9                    1.810E+12    0.53   10510.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c7h15ojC=c2h5+nc4h9hco                  1.530E+14   -0.03   10260.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c7h15ojD=nc3h7+nc3h7hco                 7.350E+15   -0.30   11711.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h15q REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

c7h15qA=oh+c7h15ojA                  1.500E+16    0.00   42500.0 !
Curran
c7h15qB=oh+c7h15ojB                  1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c7h15qC=oh+c7h15ojC                  1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c7h15qD=oh+c7h15ojD                  1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
```

```
!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h15qj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!**************************
! 1) isomerisation to QOOh
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!**************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c7h15qjA=c7h14rBqA                   3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjA=c7h14rCqA                   5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjA=c7h14rDqA                   9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjA=c7h14rEqA                   1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c7h15qjB=c7h14rAqB                   5.030E+09    1.00   35500.0 !
5-member ring, 3 primary H atoms
c7h15qjB=c7h14rCqB                   3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjB=c7h14rDqB                   5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjB=c7h14rEqB                   9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjB=c7h14rFqB                   1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c7h15qjC=c7h14rAqC                   8.630E+08    1.00   28000.0 !
6-member ring, 3 primary H atoms
c7h15qjC=c7h14rBqC                   3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjC=c7h14rDqC                   3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjC=c7h14rEqC                   5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjC=c7h14rFqC                   9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c7h15qjC=c7h14rGqC                   2.550E+07    1.00   24000.0 !
8-member ring, 3 primary H atoms

c7h15qjD=c7h14rAqD                   2.966E+08    1.00   25000.0 !
7-member ring, 6 primary H atoms
c7h15qjD=c7h14rBqD                   1.150E+09    1.00   25000.0 !
6-member ring, 4 secondary H atoms
c7h15qjD=c7h14rCqD                   6.700E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 4 secondary H atoms

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c7h15qjA+ho2=c7h15qA+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
```

```
c7h15qjD+ho2=c7h15qB+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c7h15qjC+ho2=c7h15qC+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c7h15qjB+ho2=c7h15qD+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran

c7h15qjA+ho2=c7h15ojA+oh+o2          1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjD+ho2=c7h15ojB+oh+o2          1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjC+ho2=c7h15ojC+oh+o2          1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjB+ho2=c7h15ojD+oh+o2          1.000E+11    0.00       0.0

c7h15qjA+ch3o2=c7h15ojA+ch3o+o2      1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjD+ch3o2=c7h15ojB+ch3o+o2      1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjC+ch3o2=c7h15ojC+ch3o+o2      1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjB+ch3o2=c7h15ojD+ch3o+o2      1.000E+11    0.00       0.0

c7h15qjA+c2h5o2=c7h15ojA+c2h5o+o2    1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjD+c2h5o2=c7h15ojB+c2h5o+o2    1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjC+c2h5o2=c7h15ojC+c2h5o+o2    1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjB+c2h5o2=c7h15ojD+c2h5o+o2    1.000E+11    0.00       0.0

c7h15qjA+nc3h7o2=c7h15ojA+nc3h7o+o2  1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjD+nc3h7o2=c7h15ojB+nc3h7o+o2  1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjC+nc3h7o2=c7h15ojC+nc3h7o+o2  1.000E+11    0.00       0.0
c7h15qjB+nc3h7o2=c7h15ojD+nc3h7o+o2  1.000E+11    0.00       0.0

c7h15qjA+c7h15qjA=c7h15ojA+c7h15ojA+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjA+c7h15qjB=c7h15ojA+c7h15ojB+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjA+c7h15qjC=c7h15ojA+c7h15ojC+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjA+c7h15qjD=c7h15ojA+c7h15ojD+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjB+c7h15qjB=c7h15ojB+c7h15ojB+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjB+c7h15qjC=c7h15ojB+c7h15ojC+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjB+c7h15qjD=c7h15ojB+c7h15ojD+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjC+c7h15qjC=c7h15ojC+c7h15ojC+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjC+c7h15qjD=c7h15ojC+c7h15ojD+o2      1.000E+11    0.00
0.0
c7h15qjD+c7h15qjD=c7h15ojD+c7h15ojD+o2      1.000E+11    0.00
0.0

!#####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h14rXqjY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#####################

!**************************
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
```

```
!***************************

c7h14rDqA=c5h10+c2h4o2h                 2.000E+13    0.00   28700.0 !
c7h14rEqA=c4h8+c3h6ooh1-3               2.000E+13    0.00   28700.0 !

c7h14rEqB=c4h8+c3h6ooh2-1               2.000E+13    0.00   28700.0 !
c7h14rFqB=c3h6+c4h8rDqB                 2.000E+13    0.00   28700.0 !

c7h14rFqC=c3h6+c4h8rAqB                 2.000E+13    0.00   28700.0 !
c7h14rGqC=c2h4+c5h10rAqC                2.000E+13    0.00   28700.0 !

c7h14rAqD=c2h4+c5h10rAqB                2.000E+13    0.00   28700.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c9h18rYqX+o2=c9h18qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!c7h14rAqB+o2=c7h14qjAqB                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!c7h14rAqC+o2=c7h14qjAqC                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

!c7h14rAqD+o2=c7h14qjAqD                 4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD                 1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
```

```
c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c7h14rAqB+o2=c7h14qjAqB                 1.500E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB                 1.050E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

c7h14rAqC+o2=c7h14qjAqC                 9.000E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC                 9.500E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC                 1.050E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC                 1.800E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC                 9.000E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c7h14rAqD+o2=c7h14qjAqD                 9.000E+18    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD                 1.700E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD                 1.050E+19    -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c7h14rAqC=oh+c2h4+nc4h9hco             5.000E+13    0.00   25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rCqA=oh+ch2o+c6h12-1              5.000E+13    0.00   25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rBqD=oh+nc3h7hco+c3h6             5.000E+13    0.00   25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rDqB=oh+ch3hco+c5h10              5.000E+13    0.00   25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rEqC=oh+ethco+c4h8                5.000E+13    0.00   25500.0 !
Curran 1998

c7h14rAqC=oh+c2h4+nc4h9hco             2.660E+04    3.035  24773.0 !
c7h14rCqA=oh+ch2o+c6h12-1              1.470E+13    0.40   28543.0 !
c7h14rBqD=oh+nc3h7hco+c3h6             4.720E+03    3.346  23974.0 !
c7h14rDqB=oh+ch3hco+c5h10              1.420E+05    2.89   24777.0 !
c7h14rEqC=oh+ethco+c4h8                3.960E+04    3.07   24093.0 !


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
!   (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c7h14rBqA=oh+c7h14o-AB                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
```

```
divided by 2
c7h14rCqA=oh+c7h14o-AC                 9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rDqA=oh+c7h14o-AD                 3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c7h14rEqA=oh+c7h14o-AE                 1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c7h14rAqB=oh+c7h14o-AB                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rCqB=oh+c7h14o-BC                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rDqB=oh+c7h14o-BD                 9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rEqB=oh+c7h14o-BE                 3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c7h14rFqB=oh+c7h14o-BF                 1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c7h14rBqC=oh+c7h14o-BC                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rAqC=oh+c7h14o-AC                 9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rDqC=oh+c7h14o-CD                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rEqC=oh+c7h14o-CE                 9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rFqC=oh+c7h14o-BE                 3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c7h14rGqC=oh+c7h14o-AE                 1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c7h14rCqD=oh+c7h14o-CD                 2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rBqD=oh+c7h14o-BD                 9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rAqD=oh+c7h14o-AD                 3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
!    alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

ho2+c7h14-1=c7h14rAqB                  1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-1=c7h14rBqA                  1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-2=c7h14rBqC                  1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-2=c7h14rCqB                  1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-3=c7h14rCqD                  1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-3=c7h14rDqC                  1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran


!####################
```

```
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h14qjXqY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

!***************************
! ketohydroperoxides formation
!***************************

c7h14qjBqA=>oh+c7h13oAqB               3.350E+09    1.00   33500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c7h14qjCqA=>oh+c7h13oAqC               5.750E+08    1.00   26000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c7h14qjDqA=>oh+c7h13oAqD               9.890E+07    1.00   23000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c7h14qjEqA=>oh+c7h13oAqE               1.700E+07    1.00   22000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol

c7h14qjAqB=>oh+c7h13oBqA               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjCqB=>oh+c7h13oBqC               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjDqB=>oh+c7h13oBqD               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBqE               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBqF               8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c7h14qjAqC=>oh+c7h13oCqA               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG               8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c7h14qjAqD=>oh+c7h13oDqA               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

!c7h14qjBqA=>oh+c7h13oAqB               3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c7h14qjCqA=>oh+c7h13oAqC               5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c7h14qjDqA=>oh+c7h13oAqD               9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c7h14qjEqA=>oh+c7h13oAqE               1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

!c7h14qjAqB=>oh+c7h13oBqA               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjCqB=>oh+c7h13oBqC               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjDqB=>oh+c7h13oBqD               2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
```

```
!c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBqE               4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBqF               8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c7h14qjAqC=>oh+c7h13oCqA               2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE               2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF               4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG               8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c7h14qjAqD=>oh+c7h13oDqA               4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB               2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC               1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h13oq REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!*********************************
! Ketohydroperoxide decomposition
!*********************************

!c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco             1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oAqE=>oh+ethco+c3h6cho-1          1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co             1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oBqC=>oh+ch3co+nc4h9hco           1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oBqD=>oh+nc3h7hco+ch2cooch3       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oBqE=>oh+ch3coc2h4p+ethco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oBqF=>oh+ch3hco+c3h6cooch3-1      1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c7h13oCqA=>oh+ch2o+nc4h9cooch2         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9co           1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oCqD=>oh+c2h5co+nc3h7hco          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oCqE=>oh+c2h5cooch2+ethco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oCqF=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4p       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h5coc3h6-1        1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c7h13oDqA=>oh+ch2o+nc3h7coc2h4p        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oDqB=>oh+ch3hco+nc3h7cooch2       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c7h13oDqC=>oh+ethco+c3h7co             1.000E+16    0.00   44500.0 !

c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oAqE=>oh+ethco+c3h6cho-1          1.500E+16    0.00   44500.0 !

c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oBqC=>oh+ch3co+nc4h9hco           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oBqD=>oh+nc3h7hco+ch2cooch3       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oBqE=>oh+ch3coc2h4p+ethco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oBqF=>oh+ch3hco+c3h6cooch3-1      1.500E+16    0.00   44500.0 !

c7h13oCqA=>oh+ch2o+nc4h9cooch2         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9co           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oCqD=>oh+c2h5co+nc3h7hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oCqE=>oh+c2h5cooch2+ethco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oCqF=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4p       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h5coc3h6-1        1.500E+16    0.00   44500.0 !

c7h13oDqA=>oh+ch2o+nc3h7coc2h4p        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oDqB=>oh+ch3hco+nc3h7cooch2       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c7h13oDqC=>oh+ethco+c3h7co             1.500E+16    0.00   44500.0 !


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h14o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!*********************************
! O-ring decomposition
!*********************************

c7h14o-AB+h=>h2+acrol+pc4h9            4.800E+08    1.50    2785.0 !
c7h14o-AB+oh=>h2o+acrol+pc4h9          2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AB+ho2=>h2o2+acrol+pc4h9        2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-AB+h=>h2+nc5h11cooch2           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-AB+oh=>h2o+nc5h11cooch2         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AB+ho2=>h2o2+nc5h11cooch2       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-BC+h=>h2+mvk+nc3h7              2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-BC+oh=>h2o+mvk+nc3h7            1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-BC+ho2=>h2o2+mvk+nc3h7          1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-BC+h=>h2+ch3chco+pc4h9          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-BC+oh=>h2o+ch3chco+pc4h9        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+pc4h9      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+c2h5        2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+c2h5      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+c2h5    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc3h7         2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc3h7       1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc3h7     1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-AC+h=>h2+hco+c6h12-1            4.800E+08    1.50    2785.0 !
c7h14o-AC+oh=>h2o+hco+c6h12-1          2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AC+ho2=>h2o2+hco+c6h12-1        2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-AC+h=>h2+nc4h9coc2h4p           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-AC+oh=>h2o+nc4h9coc2h4p         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AC+ho2=>h2o2+nc4h9coc2h4p       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-BD+h=>h2+c5h10+ch3co            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-BD+oh=>h2o+c5h10+ch3co          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c5h10+ch3co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-BD+h=>h2+c3h6+c3h7co            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-BD+oh=>h2o+c3h6+c3h7co          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c3h7co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-CE+h=>h2+c4h8+c2h5co            4.800E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-CE+oh=>h2o+c4h8+c2h5co          2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-AD+h=>h2+ch2hco+c5h10           4.800E+08    1.50    2785.0 !
!c7h14o-AD+oh=>h2o+ch2hco+c5h10         2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AD+oh=>h2o+ch2hco+c5h10         2.400E+13    0.00    5955.0 !
idem oxirane+oh/2
c7h14o-AD+ho2=>h2o2+ch2hco+c5h10       2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-AD+h=>h2+nc3h7coc3h6-1          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-AD+oh=>h2o+nc3h7coc3h6-1        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AD+ho2=>h2o2+nc3h7coc3h6-1      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-BE+h=>h2+c4h8+ch2cooch3         2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-BE+oh=>h2o+c4h8+ch2cooch3       1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c4h8+ch2cooch3     1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-BE+h=>h2+c3h6+c2h5cooch2        2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-BE+oh=>h2o+c3h6+c2h5cooch2      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5cooch2    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-AE+h=>h2+ch2ch2hco+c4h8         4.800E+08    1.50    2785.0 !
c7h14o-AE+oh=>h2o+ch2ch2hco+c4h8       2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AE+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c4h8     2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-AE+h=>h2+c2h4+c2h5coc2h4p       2.400E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-AE+oh=>h2o+c2h4+c2h5coc2h4p     1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coc2h4p   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c7h14o-BF+h=>h2+c2h4+c3h6cooch3-1      4.800E+08    1.50    2005.0 !
c7h14o-BF+oh=>h2o+c2h4+c3h6cooch3-1    2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c7h14o-BF+ho2=>h2o2+c2h4+c3h6cooch3-1  1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!#################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c7h14 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#################

!*********************************
! 1) addition of h and Ch3
! 2) addition of Oh
! 3) addition of O
! 4) addition of ho2
! 5) decomposition by R
!*********************************

c7h14-1=pc4h9+ac3h5                    2.500E+16    0.00   70000.0 !
Yahyaoui
c2h3+Ac5h11=c7h14-1                    1.000E+13    0.00       0.0 !
Yahyaoui
c7h14-1=c3h6+c4h8                      4.000E+12    0.00   57430.0 !
Yahyaoui
Ec5h9-1+c2h5=c7h14-1                   1.000E+13    0.00       0.0  !
TER 5468

Cc7h13-1+h=c7h14-1                     1.000E+13    0.00       0.0 !
Yahyaoui

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition of Oh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c7h14-1+oh=>ch3+c5h11hco               1.400E+12    0.00    -900.0
!
!c7h14-1+oh=>ch2o+Ac6h13                1.400E+12    0.00    -900.0
!

!c7h14-1+oh=ch3+c5h11hco                1.000E+11    0.00   -4000.0 !
Westbrook 2009
c7h14-1+oh=ch2o+Ac6h13                 1.000E+11    0.00   -4000.0 !
Westbrook 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) addition of O
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c7h14-1+o=ch2hco+Ac5h11                1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009

!c7h14-1+o=>ch2co+ch3+h+2c2h4           3.400E+07    1.83     550.0
! AOZ 5222

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) decomposition by R
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!


c7h14-1+o2=Cc7h13-1+ho2                4.000E+12    0.00   40000.0 !
idem 1-hexene
c7h14-1+ho2=h2o2+Cc7h13-1              6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c7h14-1+o=oh+Cc7h13-1                  4.000E+13    0.00    4000.0 !
idem 1-hexene
c7h14-1+h=h2+Cc7h13-1                  6.550E+12    0.00    4445.0 !
idem 1-hexene
c7h14-1+oh=h2o+Cc7h13-1                4.186E+06    2.00    -543.0 !
idem c4h8
c7h14-1+ch3=ch4+Cc7h13-1               2.000E+11    0.00    6800.0 !
idem 1-hexene
c7h14-1+c2h3=c2h4+Cc7h13-1             2.000E+11    0.00    6800.0 !
idem 1-hexene
c7h14-1+nc3h7=c3h8+Cc7h13-1            1.000E+11    0.00    8300.0 !
idem 1-hexene
```

```
c7h14-1+oh=h2o+c5h8-14+c2h5             1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c7h14-1+oh=h2o+c4h8+ac3h5               1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c7h14-1+oh=h2o+c3h6+Dc4h7-1             1.000E+06    2.00    -597.0 !
idem n-alkanes
c7h14-1+oh=h2o+c2h4+Ec5h9-1             7.050E+06    1.80     974.0 !
idem n-alkanes

Cc7h13-1=c4h6+nc3h7                     1.339E+15   -0.52   38320.0 !
Curran
Cc7h13-1+ho2=pc4h9+acrol+oh             1.000E+12    0.00    8000.0 !
Yahyaoui

c7h14-2+h=h2+c2h5+c5h8-13              1.700E+05    2.50    2490.0  !
c7h14-2+oh=h2o+c2h5+c5h8-13            3.100E+06    2.00    -300.0  !
c7h14-2+ho2=h2o2+c2h5+c5h8-13          9.600E+03    2.60   13900.0  !
c7h14-2+ch3=ch4+c2h5+c5h8-13           2.200E+00    3.50    5675.0  !
c7h14-2+ch3o2=ch3o2h+c2h5+c5h8-13      2.200E+00    3.50    5675.0  !
c7h14-2+c2h5=c2h6+c2h5+c5h8-13         2.200E+00    3.50    6835.0  !
c7h14-2+o=oh+c2h5+c5h8-13              6.000E+10    0.70    7682.0  !

c7h14-3+h=h2+c2h5+c5h8-13              1.700E+05    2.50    2490.0  !
c7h14-3+oh=h2o+c2h5+c5h8-13            3.100E+06    2.00    -300.0  !
c7h14-3+ho2=h2o2+c2h5+c5h8-13          9.600E+03    2.60   13900.0  !
c7h14-3+ch3=ch4+c2h5+c5h8-13           2.200E+00    3.50    5675.0  !
c7h14-3+ch3o2=ch3o2h+c2h5+c5h8-13      2.200E+00    3.50    5675.0  !
c7h14-3+c2h5=c2h6+c2h5+c5h8-13         2.200E+00    3.50    6835.0  !
c7h14-3+o=oh+c2h5+c5h8-13              6.000E+10    0.70    7682.0  !

c7h14-2+oh=>ch3hco+Ac5h11              1.400E+12    0.00    -900.0  !
c7h14-2+oh=>c2h5+nc4h9hco              1.400E+12    0.00    -900.0  !

c7h14-3+oh=>ethco+pc4h9                1.400E+12    0.00    -900.0  !
c7h14-3+oh=>nc3h7+nc3h7hco             1.400E+12    0.00    -900.0  !


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! heptanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

c6h13hco+h=h2+c6h13co                   4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5352
c6h13hco+oh=h2o+c6h13co                 4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5353
c6h13hco+ho2=h2o2+c6h13co               1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5354
c6h13hco+ch3=ch4+c6h13co                2.0E-0006    5.60    2500.0  !
ALD 5355
c6h13hco+c2h5=c2h6+c6h13co              1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5356

c6h13co+M=co+Ac6h13+M                   8.640E+15    0.00   14400.0 !
c6h13co+ho2=>co2+oh+Ac6h13              2.000E+13    0.00       0.0  !

!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! heptanone REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

heptanone+h=>h2+ch2co+ch3+2c2h4         2.700E+07    2.00    5000.0  !
```

```
FCO 5426
heptanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+2c2h4      7.800E+06    2.00    -765.0  !
FCO 5427
heptanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+2c2h4    1.200E+12    0.00   15500.0  !
FCO 5428
heptanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+2c2h4     6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5429
heptanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+2c2h4    6.000E+11    0.00
9600.0  ! FCO 5430
heptanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+2c2h4   6.000E+11    0.00   11000.0  !
FCO 5431

!##############################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! hept-6-enal c6h11hco reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##############################

c6h11hco=Fc6h11-1+hco                  7.250E+16    0.00   82400.0 !
idem ethco
c6h11hco+o2=c6h11co+ho2                2.000E+13    0.50   42200.0 !
idem ethco
c6h11hco+ho2=c6h11co+h2o2              1.700E+12    0.00   10700.0 !
idem ethco
c6h11hco+oh=c6h11co+h2o                2.350E+10    0.73   -1113.0 !
idem ethco
c6h11hco+o=c6h11co+oh                  5.850E+12    0.00    1808.0 !
idem ethco
c6h11hco+h=c6h11co+h2                  5.540E+02    3.50    5167.0 !
idem ethco
c6h11hco+ch3=c6h11co+ch4               2.250E+00    4.00    8285.0 !
idem ethco
c6h11hco+c2h5=c6h11co+c2h6             1.640E+00    3.65    9141.0 !
idem ethco
c6h11hco+hco=c6h11co+ch2o              4.700E+04    2.72   18235.0 !
idem ethco
c6h11hco+c2h3=c6h11co+c2h4             8.500E+09    0.0     6000.0 !
idem ethco

!##############################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!c6h11co reactions hept-6-enoyle
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##############################

c6h11co=Fc6h11-1+co                    2.000E+13    0.00   28700.0 !
Curran c2h5co=c2h5+co! idem ethco Konnov


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€ SOUS mECANISmE C7
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!************************************
!**** 3-methylhexa-1,5-diene mhd ****
!************************************
```

```
mhd=>Cc4h7-1+ac3h5                      5.000E+15    0.00   72800.0 !
(SChARFE85)
mhd=>ch3+c6h9                           5.000E+16    0.00   73000.0 !
(SChARFE85)

!************************************************
!**** Radical 3-methylene hex-1-yle P2c4h614 ****
!************************************************

P2c4h614=P2c4h513+h                     4.260E+13    0.00   38600.0 !
(id Ac5h11/RTI)

!****************************************
!**** 3-methylene hex-1-ène P2c4h513 ****
!****************************************

P2c4h513=>isopy+c2h5                    1.000E+16    0.00   71000.0 !
(RTI id AC15h30)

P2c4h513+h=P2c4h4134+h2                 6.550E+12    0.00    4445.0 !
idem c6h12+h Yahyaoui
P2c4h513+oh=P2c4h4134+h2o               3.000E+12    0.00    1230.0 !
idem c6h12+oh Yahyaoui/2
P2c4h513+ho2=P2c4h4134+h2o2             1.000E+11    0.00   17060.0 !
idem c6h12+ho2 Yahyaoui
P2c4h513+o2=P2c4h4134+ho2               4.000E+12    0.00   40000.0 !
idem c6h12+o2 Yahyaoui
P2c4h513+ch3=P2c4h4134+ch4              2.000E+11    0.00    6800.0 !
idem c6h12+ch3 Yahyaoui

P2c4h4134=>c2h3+c5h8-12                 1.000E+11    0.00   37000.0 !
idem Dc7h13-1=c2h3+c5h10
c5h8-12=>c3h3+c2h5                      2.000E+15    0.00   75000.0 !
idem C6h1012 Yahyaoui
c5h8-12=c5h8-13                         2.500E+13    0.00   63000.0 !
idem C6h1012 Yahyaoui

!******************************************
!**** hept-3-en-1-yle radical Ac7h13-3 ****
!******************************************

Ac7h13-3=c2h4+Ac5h9-1                   1.000E+11    0.00   37000.0 !
(WESTB.87)
Ac7h13-3=c7h12-13+h                     4.260E+13    0.00   38600.0 !
(id c5h11/RTI)

!******************************************
!**** hept-1-en-4-yle radical Dc7h13-1 ****
!******************************************

Dc7h13-1=c2h3+c5h10                     1.000E+11    0.00   37000.0 !
(WESTB.87)
Dc7h13-1=c7h12-13+h                     4.260E+13    0.00   38600.0 !
(id c5h11/RTI)

!*********************************
!**** hepta-1,6-diène c7h12-16 ****
!*********************************

c7h12-16=ac3h5+Dc4h7-1                  1.000E+16    0.00   71000.0 !
(RTI id AC15h30)

!*********************************
!**** hepta-1,3-diène c7h12-13 ****
```

```
!***********************************

c7h12-13=c5h7+c2h5                     1.000E+16    0.00   71000.0 !
(RTI id AC15h30)


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€        SOUS-mECANISmE C8
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

nc8h18=pc4h9+pc4h9                    2.000E+17    0.00   83180.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595
nc8h18=nc3h7+Ac5h11                   2.000E+17    0.00   83400.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595
nc8h18=c2h5+Ac6h13                    2.000E+17    0.00   83680.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595
nc8h18=ch3+Ac7h15                     2.000E+17    0.00   85570.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595


nc8h18=h+Ac8h17                       1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati
nc8h18=h+Bc8h17                       1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati
nc8h18=h+Cc8h17                       1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati
nc8h18=h+Dc8h17                       1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati

!*************************
! Bimolecular initiation
!nc8h18+o2=ho2+c10h21
!*************************

nc8h18+o2=ho2+Ac8h17                 4.000E+13   0.000   50870.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc8h18+o2=ho2+Bc8h17                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc8h18+o2=ho2+Cc8h17                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc8h18+o2=ho2+Dc8h17                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-

!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! mETAhTESIS REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!*************************
! metathesis reactions
! nc8h18+X=hX+c10h21
! X= oh, ho2, h, o, ch3, c2h5, c2h3
```

```
! ac3h5, sc3h5, tc3h5, hco, ch3o
!**************************

nc8h18+oh=h2o+Ac8h17                  1.410E+07    1.80     973.7  !
mati
nc8h18+oh=h2o+Bc8h17                  1.990E+06    2.00    -596.2  !
mati
nc8h18+oh=h2o+Cc8h17                  2.250E+06    2.00   -1391.0  !
mati
nc8h18+oh=h2o+Dc8h17                  2.250E+06    2.00   -1391.0  !
mati

nc8h18+ho2=h2o2+Ac8h17                3.600E+04    2.50   16683.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc8h18+ho2=h2o2+Bc8h17                4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc8h18+ho2=h2o2+Cc8h17                4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc8h18+ho2=h2o2+Dc8h17                4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365

nc8h18+h=h2+Ac8h17                    5.700E+07    2.00    7700.0  !
mE 2942 CW
nc8h18+h=h2+Bc8h17                    1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2943 CW
nc8h18+h=h2+Cc8h17                    1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2944 CW
nc8h18+h=h2+Dc8h17                    1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2945 CW

o+nc8h18=oh+Ac8h17                    1.000E+14    0.00    7850.0  !
mE 2937 CW
o+nc8h18=oh+Bc8h17                    5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2938 CW
o+nc8h18=oh+Cc8h17                    5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2939 CW
o+nc8h18=oh+Dc8h17                    5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2940 CW

nc8h18+ch3=ch4+Ac8h17                 6.000E-01    4.00    8200.0  !
mE 2957 CN
nc8h18+ch3=ch4+Bc8h17                 4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2958 CN
nc8h18+ch3=ch4+Cc8h17                 4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2959 CN
nc8h18+ch3=ch4+Dc8h17                 4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2960 CN

nc8h18+c2h5=c2h6+Ac8h17               6.000E+11    0.00   13500.0  !
mE 2992 CR
nc8h18+c2h5=c2h6+Bc8h17               4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2993 CN
nc8h18+c2h5=c2h6+Cc8h17               4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2994 CN
nc8h18+c2h5=c2h6+Dc8h17               4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2995 CN

nc8h18+hco=ch2o+Ac8h17                2.000E+05    2.50   18500.0  !
mE 2962 CN
nc8h18+hco=ch2o+Bc8h17                2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2963 CN
nc8h18+hco=ch2o+Cc8h17                2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2964 CN
nc8h18+hco=ch2o+Dc8h17                2.200E+07    1.90   17000.0  !
```

```
mE 2965 CN

nc8h18+ch3o=ch3oh+Ac8h17              3.200E+11    0.00    7300.0  ! mE
2972 CN
nc8h18+ch3o=ch3oh+Bc8h17              2.900E+11    0.00    4500.0  ! mE
2973 CN
nc8h18+ch3o=ch3oh+Cc8h17              2.900E+11    0.00    4500.0  ! mE
2974 CN
nc8h18+ch3o=ch3oh+Dc8h17              2.900E+11    0.00    4500.0  ! mE
2975 CN

nc8h18+ch2oh=ch3oh+Ac8h17             2.000E+02    2.95   14000.0  !
mE 2967 CN
nc8h18+ch2oh=ch3oh+Bc8h17             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2968 CN
nc8h18+ch2oh=ch3oh+Cc8h17             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2969 CN
nc8h18+ch2oh=ch3oh+Dc8h17             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2970 CN

nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Ac8h17            1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 2977 CN
nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Bc8h17            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2978 CN
nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Cc8h17            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2979 CN
nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Dc8h17            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2980 CN

nc8h18+ch2hco=ch3hco+Ac8h17           6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3002 CR
nc8h18+ch2hco=ch3hco+Bc8h17           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3003 CR
nc8h18+ch2hco=ch3hco+Cc8h17           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3004 CR
nc8h18+ch2hco=ch3hco+Dc8h17           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3005 CR

nc8h18+ch3co=ch3hco+Ac8h17            3.000E+11    0.00   15000.0  !
mE 3007 CR
nc8h18+ch3co=ch3hco+Bc8h17            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3008 CR
nc8h18+ch3co=ch3hco+Cc8h17            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3009 CR
nc8h18+ch3co=ch3hco+Dc8h17            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3010 CR

nc8h18+nc3h7=c3h8+Ac8h17              6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3032 CR
nc8h18+nc3h7=c3h8+Bc8h17              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3033 CR
nc8h18+nc3h7=c3h8+Cc8h17              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3034 CR
nc8h18+nc3h7=c3h8+Dc8h17              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3035 CR

nc8h18+pc4h9=c4h10+Ac8h17             6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3037 CR
nc8h18+pc4h9=c4h10+Bc8h17             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3038 CR
nc8h18+pc4h9=c4h10+Cc8h17             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3039 CR
nc8h18+pc4h9=c4h10+Dc8h17             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3040 CR
```

```
nc8h18+ac3h5=c3h6+Ac8h17              1.200E+02    3.30   19840.0 !
nc8h18+ac3h5=c3h6+Bc8h17              8.000E+01    3.30   18170.0 !
nc8h18+ac3h5=c3h6+Cc8h17              8.000E+01    3.30   18170.0 !
nc8h18+ac3h5=c3h6+Dc8h17              8.000E+01    3.30   18170.0 !

nc8h18+o2cho=Ac8h17+ho2cho              1.680E+13    0.00   20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc8h18+o2cho=Bc8h17+ho2cho              1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc8h18+o2cho=Cc8h17+ho2cho              1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc8h18+o2cho=Dc8h17+ho2cho              1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h17 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

!**************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!**************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!Ac8h17=Ac6h13+c2h4                      2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1703 CW
!!Dc8h17=nc3h7+c5h10                      2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1743 CW
!!Dc8h17=c2h5+c6h12-1                     2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1744 CW
!!Cc8h17=pc4h9+c4h8                       2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1747 CW
!!Cc8h17=ch3+c7h14-1                      2.000E+13  0.00  31000.0  !
DE 1748 CN
!!Bc8h17=Ac5h11+c3h6                      2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1751 CW

Ac8h17=Ac6h13+c2h4                     9.120E+11  0.31  27240.5 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Bc8h17=Ac5h11+c3h6                     6.025E+10  0.84  27822.8 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Cc8h17=pc4h9+c4h8                      2.041E+13  0.04  28496.5 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Cc8h17=ch3+c7h14-1                     9.550E+09  1.08  29390.7 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Dc8h17=nc3h7+c5h10                     5.495E+11  0.55  28087.1 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Dc8h17=c2h5+c6h12-1                    8.510E+09  1.11  27025.9 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
Ac8h17=h+c8h16-1                        3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1704 CN
Bc8h17=h+c8h16-1                        3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1704 CN
Bc8h17=h+c8h16-2                        3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1704 CN
Cc8h17=h+c8h16-2                        3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1704 CN
Cc8h17=h+c8h16-3                        3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1704 CN
Dc8h17=h+c8h16-3                        3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1704 CN
Dc8h17=h+c8h16-4                        3.000E+13    0.00   38000.0  !
DE 1704 CN


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac8h17+o2=c8h16-1+ho2                     1.900E+12    0.00    5000.0
! OX 2574 CN
Dc8h17+o2=c8h16-4+ho2                     1.900E+12    0.00    5000.0
! OX 2596 CN
Dc8h17+o2=c8h16-3+ho2                     1.900E+12    0.00    5000.0
! OX 2597 CN
Cc8h17+o2=c8h16-3+ho2                     1.900E+12    0.00    5000.0
! OX 2598 CN
Cc8h17+o2=c8h16-2+ho2                     1.900E+12    0.00    5000.0
! OX 2599 CN
Bc8h17+o2=c8h16-2+ho2                     1.900E+12    0.00    5000.0
! OX 2600 CN
Bc8h17+o2=c8h16-1+ho2                     8.100E+11    0.00    5000.0
! OX 2601 CN

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac8h17=Cc8h17                          2.951E+00    3.08   11017.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                 rev / 3.311E+00    3.11   13074.0 /
Ac8h17=Dc8h17                          6.520E-03    3.95    9665.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                 rev / 5.300E-04    4.29   11757.0 /

Bc8h17=Cc8h17                          1.862E+00    3.27   13199.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                 rev / 2.138E+01    2.96   13165.0 /
Bc8h17=Dc8h17                          1.412E+00    3.32   16146.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
                                 rev / 1.177E+00    3.32   16152.0 /


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac8h17+o2=c8h17qjA                      4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!Bc8h17+o2=c8h17qjB                      1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Cc8h17+o2=c8h17qjC                      1.840E+45  -11.10    6538.0 !
```

```
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Dc8h17+o2=c8h17qjD                    1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!Ac8h17+o2=c8h17qjA                    9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!Bc8h17+o2=c8h17qjB                    1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!Cc8h17+o2=c8h17qjC                    1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Dc8h17+o2=c8h17qjD                    1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h17qj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!***************************
! 1) isomerisation to QOOh
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h17qjA=c8h16rBqA                     3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjA=c8h16rCqA                     5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjA=c8h16rDqA                     9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjA=c8h16rEqA                     1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c8h17qjB=c8h16rAqB                     5.030E+09    1.00   35500.0 !
5-member ring, 3 primary H atoms
c8h17qjB=c8h16rCqB                     3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjB=c8h16rDqB                     5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjB=c8h16rEqB                     9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjB=c8h16rFqB                     1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c8h17qjC=c8h16rAqC                     8.630E+08    1.00   28000.0 !
6-member ring, 3 primary H atoms
c8h17qjC=c8h16rBqC                     3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjC=c8h16rDqC                     3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjC=c8h16rEqC                     5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjC=c8h16rFqC                     9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjC=c8h16rGqC                     1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c8h17qjD=c8h16rAqD                     1.480E+08    1.00   25000.0 !
7-member ring, 3 primary H atoms

c8h17qjD=c8h16rBqD                     5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjD=c8h16rCqD                     3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjD=c8h16rEqD                     3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjD=c8h16rFqD                     5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjD=c8h16rGqD                     9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c8h17qjD=c8h16rHqD                     2.500E+07    1.00   24000.0 !
8-member ring, 3 primary H atoms


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
!    ROOh formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h17qjA+ho2=nc8h17o2h+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c8h17qjB+ho2=nc8h17o2h+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c8h17qjC+ho2=nc8h17o2h+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c8h17qjD+ho2=nc8h17o2h+o2              2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran


!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h16rXqjY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

!***************************
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
!***************************

!***************************
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c9h18rYqX+o2=c9h18qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16rBqA+o2=c8h16qjBqA                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rCqA+o2=c8h16qjCqA                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rDqA+o2=c8h16qjDqA                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rEqA+o2=c8h16qjEqA                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c8h16rAqB+o2=c8h16qjAqB                1.500E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
c8h16rCqB+o2=c8h16qjCqB                1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c8h16rDqB+o2=c8h16qjDqB                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rEqB+o2=c8h16qjEqB                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rFqB+o2=c8h16qjFqB                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c8h16rAqC+o2=c8h16qjAqC                9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c8h16rBqC+o2=c8h16qjBqC                9.500E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
c8h16rDqC+o2=c8h16qjDqC                1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c8h16rEqC+o2=c8h16qjEqC                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rFqC+o2=c8h16qjFqC                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rGqC+o2=c8h16qjGqC                1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

c8h16rAqD+o2=c8h16qjAqD                9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c8h16rBqD+o2=c8h16qjBqD                1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c8h16rCqD+o2=c8h16qjCqD                1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c8h16rEqD+o2=c8h16qjEqD                1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c8h16rFqD+o2=c8h16qjFqD                1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c8h16rGqD+o2=c8h16qjGqD                1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c8h16rHqD+o2=c8h16qjHqD                9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16rAqC=>oh+c2h4+c5h11hco            5.000E+13    0.00   25500.0  !
c8h16rCqA=>oh+ch2o+c7h14-1             5.000E+13    0.00   25500.0  !
c8h16rBqD=>oh+c3h6+nc4h9hco            5.000E+13    0.00   25500.0  !
c8h16rDqB=>oh+c6h12-1+ch3hco           5.000E+13    0.00   25500.0  !
c8h16rFqD=>oh+c4h8+nc3h7hco            5.000E+13    0.00   25500.0  !
c8h16rEqC=>oh+ethco+c5h10              5.000E+13    0.00   25500.0  !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
!   (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16rBqA=oh+c8h16o#3                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c8h16rCqA=oh+c8h16o#4                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
c8h16rDqA=oh+c8h16o#5                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
c8h16rEqA=oh+c8h16o#6                  1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

c8h16rAqB=oh+c8h16o#3                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c8h16rCqB=oh+c8h16o#3                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c8h16rDqB=oh+c8h16o#4                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
c8h16rEqB=oh+c8h16o#5                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
c8h16rFqB=oh+c8h16o#6                  1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

c8h16rBqC=oh+c8h16o#3                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c8h16rAqC=oh+c8h16o#4                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
c8h16rDqC=oh+c8h16o#3                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c8h16rEqC=oh+c8h16o#4                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
c8h16rFqC=oh+c8h16o#5                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
c8h16rGqC=oh+c8h16o#6                  1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

c8h16rCqD=oh+c8h16o#3                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c8h16rBqD=oh+c8h16o#4                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
c8h16rAqD=oh+c8h16o#5                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
c8h16rEqD=oh+c8h16o#3                  2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c8h16rFqD=oh+c8h16o#4                  2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
c8h16rGqD=oh+c8h16o#5                  2.100E+08    0.00    6500.0 !
```

```
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
c8h16rHqD=oh+c8h16o#6                 1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
!   alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16rAqB=ho2+c8h16-1                 8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2124 CR
c8h16rBqA=ho2+c8h16-1                 8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 1817 CR
c8h16rBqC=ho2+c8h16-2                 8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2102 CR
c8h16rCqB=ho2+c8h16-2                 8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2126 CR
c8h16rCqD=ho2+c8h16-3                 8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2078 CR
c8h16rDqC=ho2+c8h16-3                 8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2108 CR
c8h16rEqD=ho2+c8h16-4                 8.500E+12    0.00   26000.0  !
DE 2088 CR


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h16qjXqY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!***************************
! ketohydroperoxides formation
!***************************

c8h16qjBqA=oh+c8h15oAqB               3.350E+09    1.00   33500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c8h16qjCqA=oh+c8h15oAqC               5.750E+08    1.00   26000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c8h16qjDqA=oh+c8h15oAqD               9.890E+07    1.00   23000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c8h16qjEqA=oh+c8h15oAqE               1.700E+07    1.00   22000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol

c8h16qjAqB=oh+c8h15oBqA               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjCqB=oh+c8h15oBqC               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjDqB=oh+c8h15oBqD               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjEqB=oh+c8h15oBqE               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjFqB=oh+c8h15oBqF               8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c8h16qjBqC=oh+c8h15oCqB               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjAqC=oh+c8h15oCqA               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjDqC=oh+c8h15oCqD               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjEqC=oh+c8h15oCqE               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjFqC=oh+c8h15oCqF               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjGqC=oh+c8h15oCqG               8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c8h16qjCqD=oh+c8h15oDqC               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjBqD=oh+c8h15oDqB               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjAqD=oh+c8h15oDqA               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjEqD=oh+c8h15oDqE               1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjFqD=oh+c8h15oDqF               2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjGqD=oh+c8h15oDqG               4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c8h16qjHqD=oh+c8h15oDqH               8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

!################################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! nc8h17o2h and c8h15o2h REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!################################

!**************************
! hydroperoxydes decomposition
!**************************
nc8h17o2h=>oh+ch3hco+2c2h4+c2h5       1.500E+16    0.00   42000.0  !
DKh 4883


!##################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h15oq REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!##################

!********************************
! Ketohydroperoxide decomposition
!********************************

c8h15oAqB=oh+hco+c6h13hco             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oAqC=oh+ch2hco+c5h11hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oAqD=oh+ch2ch2hco+nc4h9hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oAqE=oh+c3h6cho-1+nc3h7hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !

c8h15oBqA=oh+ch2o+c6h13co             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oBqC=oh+ch3co+c5h11hco           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oBqD=oh+ch2cooch3+nc4h9hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oBqE=oh+ch3coc2h4p+nc3h7hco      1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oBqF=oh+c3h6cooch3-1+ethco       1.500E+16    0.00   44500.0 !

c8h15oCqA=oh+ch2o+nc5h11cooch2        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oCqB=oh+ch3hco+c5h11co           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oCqD=oh+c2h5co+nc4h9hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oCqE=oh+c2h5cooch2+nc3h7hco      1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oCqF=oh+c2h5coc2h4p+ethco        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oCqG=oh+c2h5coc3h6-1+ch3hco      1.500E+16    0.00   44500.0 !

c8h15oDqA=oh+ch2o+nc4h9coc2h4p        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oDqB=oh+ch3hco+nc4h9cooch2       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oDqC=oh+ethco+nc4h9co            1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oDqE=oh+c3h7co+nc3h7hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oDqF=oh+nc3h7cooch2+ethco        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oDqG=oh+nc3h7coc2h4p+ch3hco      1.500E+16    0.00   44500.0 !
c8h15oDqH=oh+ch2o+nc3h7coc3h6-1       1.500E+16    0.00   44500.0 !


!###################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h16o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###################

!*********************************
! O-ring decomposition
!*********************************

c8h16o#3+h=>h2+ch2co+c2h5+2c2h4       2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 4977
c8h16o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5+2c2h4     7.800E+06    2.00    -765.0  !
DOR 4978
c8h16o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4   1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 4979
c8h16o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4    6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 4980
c8h16o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4    6.000E+11  0.00  9600.0  !
DOR 4981
c8h16o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4  6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 4982
c8h16o#3+o=>oh+ch2hco+3c2h4           7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5120

c8h16o#4+h=>h2+ch2hco+3c2h4           2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 5067
c8h16o#4+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4         7.800E+06    2.00    -765.0  !
DOR 5068
c8h16o#4+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4       1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 5069
c8h16o#4+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4        6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 5070
c8h16o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4   4.500E+12    0.00   17500.0  !
DOR 5071
c8h16o#4+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4      6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 5072
c8h16o#4+o=>oh+ch2hco+3c2h4           7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5121

c8h16o#5+h=>h2+ch2hco+3c2h4           2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 5073
c8h16o#5+oh=>h2o+c6h12-1+ch2hco       7.800E+06    2.00    -765.0  !
c8h16o#5+oh=>h2o+ch2co+pc4h9+c2h4     7.800E+06    2.00    -765.0  !
c8h16o#5+oh=>h2o+c5h10+ch2cooch3      7.800E+06    2.00    -765.0  !
c8h16o#5+oh=>h2o+c3h6+nc3h7cooch2      7.800E+06    2.00    -765.0
!
c8h16o#5+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4       1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 5075
c8h16o#5+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4        6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 5076
c8h16o#5+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4   4.500E+12    0.00   17500.0  !
DOR 5077
c8h16o#5+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4      6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 5078
c8h16o#5+o=>oh+ch2hco+3c2h4           7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5122
c8h16o#6+h=>h2+ch2hco+3c2h4           2.700E+07    2.00    5000.0  !
DOR 5079
c8h16o#6+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4         7.800E+06    2.00    -765.0  !
DOR 5080
c8h16o#6+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4       1.200E+12    0.00   15500.0  !
DOR 5081
c8h16o#6+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4        6.000E+11    0.00    9600.0  !
DOR 5082
c8h16o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4   4.500E+12    0.00   17500.0  !
DOR 5083
c8h16o#6+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4      6.000E+11    0.00   11000.0  !
DOR 5084
c8h16o#6+o=>oh+ch2hco+3c2h4           7.800E+13    0.00    5200.0  !
DOR 5123



!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h16 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

!********************************
! 1) addition of h and Ch3
! 2) addition of Oh
! 3) addition of O
! 4) addition of ho2
! 5) decomposition by R
!********************************

c8h16-1+ch3=Ac6h13+c3h6               9.600E+10    0.00    8000.0 !
ROL 5185

c8h16-1=Ac5h11+ac3h5                  2.500E+16    0.00   70000.0 !
Yahyaoui
c2h3+Ac6h13=c8h16-1                   1.000E+13    0.00       0.0 !
Yahyaoui
c8h16-1=c3h6+c5h10                    4.000E+12    0.00   57430.0 !
Yahyaoui
Ec5h9-1+nc3h7=c8h16-1                 8.000E+12    0.00       0.0 !
Dc4h7-1+pc4h9=c8h16-1                 8.000E+12    0.00       0.0 !
Fc6h11-1+c2h5=c8h16-1                 8.000E+12    0.00       0.0 !

Cc8h15-1+h=c8h16-1                    1.000E+13    0.00       0.0 !
Yahyaoui

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition of oh, o
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16-1+oh=ch2o+Ac7h15                1.000E+11    0.00   -4000.0 !
Westbrook 2009
c8h16-1+o=ch2hco+Ac6h13               1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) decomposition by R
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16-1+o2=Cc8h15-1+ho2               4.000E+12    0.00   40000.0 !
```

```
idem 1-hexene
c8h16-1+ho2=h2o2+Cc8h15-1              6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c8h16-1+o=oh+Cc8h15-1                  4.000E+13    0.00    4000.0 !
idem 1-hexene
c8h16-1+h=h2+Cc8h15-1                  6.550E+12    0.00    4445.0 !
idem 1-hexene
c8h16-1+oh=h2o+Cc8h15-1                4.186E+06    2.00    -543.0 !
idem c4h8
c8h16-1+ch3=ch4+Cc8h15-1               2.000E+11    0.00    6800.0 !
idem 1-hexene
c8h16-1+c2h3=c2h4+Cc8h15-1             2.000E+11    0.00    6800.0 !
idem 1-hexene
c8h16-1+nc3h7=c3h8+Cc8h15-1            1.000E+11    0.00    8300.0 !
idem 1-hexene

c8h16-1+oh=h2o+c5h8-14+nc3h7           1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c8h16-1+oh=h2o+c5h10+ac3h5             1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c8h16-1+oh=h2o+c4h8+Dc4h7-1            1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c8h16-1+oh=h2o+c3h6+Ec5h9-1            1.000E+06    2.00    -597.0 !
idem n-alkanes
c8h16-1+oh=h2o+c2h4+Fc6h11-1           7.050E+06    1.80     974.0 !
idem n-alkanes


!Cc8h15-1=c4h6+pc4h9                    2.500E+13    0.00   45000.0
Cc8h15-1=c4h6+pc4h9                    1.339E+15   -0.52   38320.0 !
Curran

Cc8h15-1+ho2=>oh+acrol+Ac5h11          1.000E+12    0.00    8000.0

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c8h14 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

ac3h5+Ec5h9-1=c8h14                    1.000E+13    0.00       0.0  !
TER 5471
Dc4h7-1+Dc4h7-1=c8h14                  1.000E+13    0.00       0.0  !
TER 5472

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! octanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

c7h15hco+h=h2+c7h15co                  4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5357
c7h15hco+oh=h2o+c7h15co                4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5358
c7h15hco+ho2=h2o2+c7h15co              1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5359
c7h15hco+ch3=ch4+c7h15co               2.0E-0006    5.60    2500.0  !
ALD 5360
c7h15hco+c2h5=c2h6+c7h15co             1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5361

c7h15co+M=co+Ac7h15+M                  8.640E+15    0.00   14400.0 !
c7h15co+ho2=>co2+oh+Ac7h15             2.000E+13    0.00       0.0  !
```

```
COR 5377


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! octanone REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

octanone+h=>h2+ch2co+c2h5+2c2h4        2.700E+07    2.00    5000.0  !
FCO 5432
octanone+oh=>h2o+ch2co+c2h5+2c2h4      7.800E+06    2.00    -765.0  !
FCO 5433
octanone+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4    1.200E+12    0.00   15500.0  !
FCO 5434
octanone+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4     6.000E+11    0.00    9600.0  !
FCO 5435
octanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4    6.000E+11    0.00
9600.0  ! FCO 5436
octanone+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4   6.000E+11    0.00   11000.0  !
FCO 5437




!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€ SOUS mECANISmE C8
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!***********************************************
!**** Oct-1-en-8-yl radical C8h15 reactions ****
!***********************************************

Hc8h15-1=Fc6h11-1+c2h4                 2.000E+13    0.00   29400.0 !
Dean




!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€        SOUS-mECANISmE C9
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€

!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! INITIATION REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!**************************
```

```
! Unimolecular initiation
!1) nc9h20=R1+R2
!2) nc9h20=h+c10h21
!**************************


nc9h20=pc4h9+Ac5h11                   2.000E+17    0.00   83180.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595
nc9h20=nc3h7+Ac6h13                   2.000E+17    0.00   83400.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595
nc9h20=c2h5+Ac7h15                    2.000E+17    0.00   83680.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595
nc9h20=ch3+Ac8h17                     2.000E+17    0.00   85570.0 !
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-
1595

!nc9h20=h+Ac9h19                        1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati
!nc9h20=h+Bc9h19                        1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati
!nc9h20=h+Cc9h19                        1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati
!nc9h20=h+Dc9h19                        1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati
!nc9h20=h+Ec9h19                        1.000E+15    0.00  100000.0  !
mati


nc9h20=h+Ac9h19                       9.610E+14    0.485  97289.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc9h20=h+Bc9h19                       1.070E+12    1.26   96900.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc9h20=h+Cc9h19                       1.550E+12    1.22   96992.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc9h20=h+Dc9h19                       1.550E+12    1.22   96992.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc9h20=h+Ec9h19                       1.550E+12    1.22   96992.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199


!**************************
! Bimolecular initiation
!
!nc9h20+o2=ho2+c10h21
!**************************


nc9h20+o2=ho2+Ac9h19                 4.000E+13   0.000   50870.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc9h20+o2=ho2+Bc9h19                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc9h20+o2=ho2+Cc9h19                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc9h20+o2=ho2+Dc9h19                 8.000E+13   0.000   47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc9h20+o2=ho2+Ec9h19                 4.000E+13   0.000   47690.0 !
```

```
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! mETAhTESIS REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!**************************
! metathesis reactions
! nc9h20+X=hX+c10h21
! X= oh, ho2, h, o, ch3, c2h5, c2h3
! ac3h5, sc3h5, tc3h5, hco, ch3o
!**************************

nc9h20+oh=h2o+Ac9h19                 1.410E+07    1.80     973.7  !
mati
nc9h20+oh=h2o+Bc9h19                 1.990E+06    2.00    -596.2  !
mati
nc9h20+oh=h2o+Cc9h19                 2.250E+06    2.00   -1391.0  !
mati
nc9h20+oh=h2o+Dc9h19                 2.250E+06    2.00   -1391.0  !
mati
nc9h20+oh=h2o+Ec9h19                 1.125E+06    2.00   -1391.0  !
mati

nc9h20+ho2=h2o2+Ac9h19               3.600E+04    2.50   16683.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc9h20+ho2=h2o2+Bc9h19               4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc9h20+ho2=h2o2+Cc9h19               4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc9h20+ho2=h2o2+Dc9h19               4.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc9h20+ho2=h2o2+Ec9h19               2.000E+04    2.50   14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365

nc9h20+h=h2+Ac9h19                   5.700E+07    2.00    7700.0  !
mE 2942 CW
nc9h20+h=h2+Bc9h19                   1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2943 CW
nc9h20+h=h2+Cc9h19                   1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2944 CW
nc9h20+h=h2+Dc9h19                   1.800E+07    2.00    5000.0  !
mE 2945 CW
nc9h20+h=h2+Ec9h19                   9.000E+06    2.00    5000.0  !
mE 2946 CW

o+nc9h20=oh+Ac9h19                   1.000E+14    0.00    7850.0  !
mE 2937 CW
o+nc9h20=oh+Bc9h19                   5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2938 CW
o+nc9h20=oh+Cc9h19                   5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2939 CW
o+nc9h20=oh+Dc9h19                   5.200E+13    0.00    5200.0  !
mE 2940 CW
o+nc9h20=oh+Ec9h19                   2.600E+13    0.00    5200.0  !
mE 2941 CW

nc9h20+ch3=ch4+Ac9h19                6.000E-01    4.00    8200.0  !
mE 2957 CN
nc9h20+ch3=ch4+Bc9h19                4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2958 CN
```

```
nc9h20+ch3=ch4+Cc9h19                 4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2959 CN
nc9h20+ch3=ch4+Dc9h19                 4.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2960 CN
nc9h20+ch3=ch4+Ec9h19                 2.000E+11    0.00    9600.0  !
mE 2961 CN

nc9h20+c2h5=c2h6+Ac9h19               6.000E+11    0.00   13500.0  !
mE 2992 CR
nc9h20+c2h5=c2h6+Bc9h19               4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2993 CN
nc9h20+c2h5=c2h6+Cc9h19               4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2994 CN
nc9h20+c2h5=c2h6+Dc9h19               4.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2995 CN
nc9h20+c2h5=c2h6+Ec9h19               2.000E+11    0.00   11000.0  !
mE 2996 CN

nc9h20+hco=ch2o+Ac9h19                2.000E+05    2.50   18500.0  !
mE 2962 CN
nc9h20+hco=ch2o+Bc9h19                2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2963 CN
nc9h20+hco=ch2o+Cc9h19                2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2964 CN
nc9h20+hco=ch2o+Dc9h19                2.200E+07    1.90   17000.0  !
mE 2965 CN
nc9h20+hco=ch2o+Ec9h19                1.100E+07    1.90   17000.0  !
mE 2966 CN

nc9h20+ch3o=ch3oh+Ac9h19              3.200E+11    0.00   7300.0  ! mE
2972 CN
nc9h20+ch3o=ch3oh+Bc9h19              2.900E+11    0.00   4500.0  ! mE
2973 CN
nc9h20+ch3o=ch3oh+Cc9h19              2.900E+11    0.00   4500.0  ! mE
2974 CN
nc9h20+ch3o=ch3oh+Dc9h19              2.900E+11    0.00   4500.0  ! mE
2975 CN
nc9h20+ch3o=ch3oh+Ec9h19              1.450E+11    0.00   4500.0  ! mE
2976 CN

nc9h20+ch2oh=ch3oh+Ac9h19             2.000E+02    2.95   14000.0  !
mE 2967 CN
nc9h20+ch2oh=ch3oh+Bc9h19             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2968 CN
nc9h20+ch2oh=ch3oh+Cc9h19             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2969 CN
nc9h20+ch2oh=ch3oh+Dc9h19             1.200E+02    2.95   12000.0  !
mE 2970 CN
nc9h20+ch2oh=ch3oh+Ec9h19             6.000E+01    2.95   12000.0  !
mE 2971 CN

nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Ac9h19            1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 2977 CN
nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Bc9h19            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2978 CN
nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Cc9h19            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2979 CN
nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Dc9h19            6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2980 CN
nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Ec9h19            3.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 2981 CN

nc9h20+ch2hco=ch3hco+Ac9h19           6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3002 CR
```

```
nc9h20+ch2hco=ch3hco+Bc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3003 CR
nc9h20+ch2hco=ch3hco+Cc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3004 CR
nc9h20+ch2hco=ch3hco+Dc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3005 CR
nc9h20+ch2hco=ch3hco+Ec9h19           2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3006 CR

nc9h20+ch3co=ch3hco+Ac9h19            3.000E+11    0.00   15000.0  !
mE 3007 CR
nc9h20+ch3co=ch3hco+Bc9h19            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3008 CR
nc9h20+ch3co=ch3hco+Cc9h19            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3009 CR
nc9h20+ch3co=ch3hco+Dc9h19            2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3010 CR
nc9h20+ch3co=ch3hco+Ec9h19            1.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3011 CR

nc9h20+nc3h7=c3h8+Ac9h19              6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3032 CR
nc9h20+nc3h7=c3h8+Bc9h19              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3033 CR
nc9h20+nc3h7=c3h8+Cc9h19              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3034 CR
nc9h20+nc3h7=c3h8+Dc9h19              4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3035 CR
nc9h20+nc3h7=c3h8+Ec9h19              2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3036 CR

nc9h20+pc4h9=c4h10+Ac9h19             6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3037 CR
nc9h20+pc4h9=c4h10+Bc9h19             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3038 CR
nc9h20+pc4h9=c4h10+Cc9h19             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3039 CR
nc9h20+pc4h9=c4h10+Dc9h19             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3040 CR
nc9h20+pc4h9=c4h10+Ec9h19             2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3041 CR

nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Ac9h19            6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3042 CR
nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Bc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3043 CR
nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Cc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3044 CR
nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Dc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3045 CR
nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Ec9h19            2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3046 CR

nc9h20+Ac6h13=c6h14+Ac9h19            6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3047 CR
nc9h20+Ac6h13=c6h14+Bc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3048 CR
nc9h20+Ac6h13=c6h14+Cc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3049 CR
nc9h20+Ac6h13=c6h14+Dc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3050 CR
nc9h20+Ac6h13=c6h14+Ec9h19            2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3051 CR
```

```
nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Ac9h19            6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3052 CR
nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Bc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3053 CR
nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Cc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3054 CR
nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Dc9h19            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3055 CR
nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Ec9h19            2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3056 CR

nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Ac9h19           6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3057 CR
nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Bc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3058 CR
nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Cc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3059 CR
nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Dc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3060 CR
nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Ec9h19           2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3061 CR

nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Bc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3063 CR
nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Cc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3064 CR
nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Dc9h19           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3065 CR
nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Ec9h19           2.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3066 CR

nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Cc9h19           4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3384 CR
nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Dc9h19           4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3385 CR
nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Ec9h19           2.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3386 CR

nc9h20+Cc9h19=nc9h20+Dc9h19           4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3180 CR
                              rev / 4.000E+11    0.00   12400.0 /
nc9h20+Cc9h19=nc9h20+Ec9h19           2.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3181 CR
                              rev / 4.000E+11    0.00   12400.0 /

nc9h20+Dc9h19=nc9h20+Ec9h19           2.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3171 CR
                              rev / 4.000E+11    0.00   12400.0 /

nc9h20+o2cho=Ac9h19+ho2cho             1.680E+13    0.00   20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc9h20+o2cho=Bc9h19+ho2cho             1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc9h20+o2cho=Cc9h19+ho2cho             1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc9h20+o2cho=Dc9h19+ho2cho             1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc9h20+o2cho=Ec9h19+ho2cho             5.600E+12    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h19 REACTIONS
```

```
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!**************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!**************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac9h19=Ac7h15+c2h4                     2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1705 CW
!Bc9h19=Ac6h13+c3h6                     2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1847 CW
!Cc9h19=Ac5h11+c4h8                     2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1760 CW
!Cc9h19=ch3+c8h16-1                     2.000E+13  0.00  31000.0  !
DE 1761 CN
!Dc9h19=pc4h9+c5h10                     2.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1754 CW
!Dc9h19=c2h5+c7h14-1                    2.000E+13  0.00  29700.0  !
DE 1755 CW
!Ec9h19=nc3h7+c6h12-1                   4.000E+13  0.00  28700.0  !
DE 1758 CW

Ac9h19=Ac7h15+c2h4                     9.120E+11    0.31   27240.5 !
Tsang et al 2009
Bc9h19=Ac6h13+c3h6                     6.025E+10    0.84   27822.8 !
Tsang et al 2009
Cc9h19=Ac5h11+c4h8                     2.041E+13    0.04   28496.5 !
Tsang et al 2009
Cc9h19=ch3+c8h16-1                     9.550E+09    1.08   29390.7 !
Tsang et al 2009
Dc9h19=pc4h9+c5h10                     2.041E+13    0.04   28496.5 !
Tsang et al 2009
Dc9h19=c2h5+c7h14-1                    8.510E+09    1.11   27025.9 !
Tsang et al 2009
Ec9h19=nc3h7+c6h12-1                   5.495E+11    0.55   28087.1 !
Tsang et al 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac9h19=h+c9h18-1                      3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE
1706 CN
!Bc9h19=h+c9h18-2                      3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE
1848 CN
!Bc9h19=h+c9h18-1                      3.000E+13  0.00  39000.0  ! DE
1849 CN
!Cc9h19=h+c9h18-2                      3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE
1756 CN
!Cc9h19=h+c9h18-3                      3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE
1756 CN
!Dc9h19=h+c9h18-3                      3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE
1756 CN
!Dc9h19=h+c9h18-4                      3.000E+13  0.00  38000.0  ! DE
1756 CN
!Ec9h19=h+c9h18-4                      6.000E+13  0.00  38000.0  ! DE
```

```
1759 CN

Ac9h19=h+c9h18-1                        1.280E+12    0.22   38372.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc9h19=h+c9h18-1                        1.950E+15   -0.555  37371.0 !
estimated from reverse constant k=4.24E+11.T^0.51.exp(-1230/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc9h19=h+c9h18-2                        2.740E+15   -0.746  36120.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc9h19=h+c9h18-2                        1.895E+15   -0.705  36028.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc9h19=h+c9h18-3                        1.080E+15   -0.65   35875.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Dc9h19=h+c9h18-3                        1.080E+15   -0.65   35875.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Dc9h19=h+c9h18-4                        1.080E+15   -0.65   35875.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Ec9h19=h+c9h18-4                        2.110E+15   -0.64   35872.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac9h19+o2=c9h18-1+ho2                  1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2575 CN
!Bc9h19+o2=c9h18-2+ho2                  1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2654 CN
!Bc9h19+o2=c9h18-1+ho2                  8.100E+11  0.00  5000.0  ! OX
2655 CN
!Cc9h19+o2=c9h18-2+ho2                  1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2605 CN
!Cc9h19+o2=c9h18-3+ho2                  1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2605 CN
!Dc9h19+o2=c9h18-3+ho2                  1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2605 CN
!Dc9h19+o2=c9h18-4+ho2                  1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2605 CN
!Ec9h19+o2=c9h18-4+ho2                  3.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2604 CN
Bc9h19+o2=c9h18-2+ho2                  1.900E+12  0.00  5000.0  ! OX
2654 CN
Bc9h19+o2=c9h18-1+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc9h19+o2=c9h18-2+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc9h19+o2=c9h18-3+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Dc9h19+o2=c9h18-3+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Dc9h19+o2=c9h18-4+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Ec9h19+o2=c9h18-4+ho2                  1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac9h19=Dc9h19                                6.380E-04    4.26    9944.0 !
                                     rev / 2.080E-03    4.13   12085.0 /
Ac9h19=Ec9h19                                2.291E+01    2.82   10757.0 !
                                     rev / 2.724E+00    3.16   12849.0 /

Bc9h19=Cc9h19                                2.951E+00    3.08   11017.0 !
                                     rev / 2.951E+00    3.08   11017.0 /
Bc9h19=Dc9h19                                1.862E+00    3.27   13199.0 !
                                     rev / 1.862E+00    3.27   13199.0 /
Bc9h19=Ec9h19                                1.412E+00    3.32   16146.0 !
                                     rev / 2.824E+00    3.32   16146.0 /

Cc9h19=Dc9h19                                1.412E+00    3.32   16146.0 !
                                     rev / 1.412E+00    3.32   16146.0 /


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac9h19+o2=c9h19qjA                          4.820E+36   -8.23    5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!Bc9h19+o2=c9h19qjB                          1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Cc9h19+o2=c9h19qjC                          1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Dc9h19+o2=c9h19qjD                          1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Ec9h19+o2=c9h19qjE                          1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!Ac9h19+o2=c9h19qjA                          9.000E+18    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!Bc9h19+o2=c9h19qjB                          1.700E+19    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!Cc9h19+o2=c9h19qjC                          1.800E+19    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Dc9h19+o2=c9h19qjD                          1.800E+19    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Ec9h19+o2=c9h19qjE                          1.800E+19    -2.50       0.0
! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) alkoxy formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac9h19+ho2=c9h19ojA+oh                     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+ho2=c9h19ojB+oh                     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+ho2=c9h19ojC+oh                     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+ho2=c9h19ojD+oh                     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+ho2=c9h19ojE+oh                     7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+ch3o2=c9h19ojA+ch3o                 7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+ch3o2=c9h19ojB+ch3o                 7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
```

```
Cc9h19+ch3o2=c9h19ojC+ch3o                 7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+ch3o2=c9h19ojD+ch3o                 7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+ch3o2=c9h19ojE+ch3o                 7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+c2h5o2=c9h19ojA+c2h5o               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+c2h5o2=c9h19ojB+c2h5o               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+c2h5o2=c9h19ojC+c2h5o               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+c2h5o2=c9h19ojD+c2h5o               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+c2h5o2=c9h19ojE+c2h5o               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+nc3h7o2=c9h19ojA+nc3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+nc3h7o2=c9h19ojB+nc3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+nc3h7o2=c9h19ojC+nc3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+nc3h7o2=c9h19ojD+nc3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+nc3h7o2=c9h19ojE+nc3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+ic3h7o2=c9h19ojA+ic3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+ic3h7o2=c9h19ojB+ic3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+ic3h7o2=c9h19ojC+ic3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+ic3h7o2=c9h19ojD+ic3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+ic3h7o2=c9h19ojE+ic3h7o             7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+c9h19qjA=2c9h19ojA                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+c9h19qjA=c9h19ojB+c9h19ojA          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+c9h19qjA=c9h19ojC+c9h19ojA          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+c9h19qjA=c9h19ojD+c9h19ojA          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+c9h19qjA=c9h19ojE+c9h19ojA          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+c9h19qjB=c9h19ojA+c9h19ojB          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+c9h19qjB=2c9h19ojB                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+c9h19qjB=c9h19ojC+c9h19ojB          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+c9h19qjB=c9h19ojD+c9h19ojB          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+c9h19qjB=c9h19ojE+c9h19ojB          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+c9h19qjC=c9h19ojA+c9h19ojC          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
```

```
Bc9h19+c9h19qjC=c9h19ojB+c9h19ojC          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+c9h19qjC=2c9h19ojC                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+c9h19qjC=c9h19ojD+c9h19ojC          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+c9h19qjC=c9h19ojE+c9h19ojC          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+c9h19qjD=c9h19ojA+c9h19ojD          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+c9h19qjD=c9h19ojB+c9h19ojD          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+c9h19qjD=c9h19ojC+c9h19ojD          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+c9h19qjD=2c9h19ojD                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+c9h19qjD=c9h19ojE+c9h19ojD          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac9h19+c9h19qjE=c9h19ojA+c9h19ojE          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc9h19+c9h19qjE=c9h19ojB+c9h19ojE          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc9h19+c9h19qjE=c9h19ojC+c9h19ojE          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc9h19+c9h19qjE=c9h19ojD+c9h19ojE          7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec9h19+c9h19qjE=2c9h19ojE                  7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h19oj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!***************************
! decomposition
! c9h19oj=aldehyde+alkyle
!***************************

c9h19ojA=ch2o+Ac8h17                       1.220E+19   -1.68   14690.0 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-3457/RT)  Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h19ojB=ch3hco+Ac7h15                     6.400E+10    0.95   10202.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h19ojB=ch3+c7h15hco                      2.080E+10    1.06   14206.0 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-9043/RT)  Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h19ojC=ethco+Ac6h13                      1.080E+11    0.92   10094.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h19ojC=c2h5+c6h13hco                     1.640E+13    0.26    9297.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h19ojD=nc3h7+c5h11hco                    1.510E+14   -0.09   11001.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h19ojD=nc3h7hco+Ac5h11                   3.960E+14   -0.13   11590.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h19ojE=pc4h9+nc4h9hco                    4.970E+14   -0.12   11232.0 !
```

```
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h19g REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

c9h19qA=oh+c9h19ojA                    1.500E+16    0.00   42500.0 !
Curran
c9h19qB=oh+c9h19ojB                    1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c9h19qC=oh+c9h19ojC                    1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c9h19qD=oh+c9h19ojD                    1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c9h19qE=oh+c9h19ojE                    1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran

!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h19qj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!***************************
! 1) isomerisation to QOOH
! 2) dismutations with ho2
!    ROOH formation
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOH
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h19qjA=c9h18rBqA                      3.300E+09    1.00   32500.0  !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjA=c9h18rCqA                      5.700E+08    1.00   25000.0  !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjA=c9h18rDqA                      9.900E+07    1.00   22000.0  !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjA=c9h18rEqA                      1.700E+07    1.00   21000.0  !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qjB=c9h18rAqB                      5.000E+09    1.00   35500.0  !
5-member ring, 3 primary H atoms
c9h19qjB=c9h18rCqB                      3.300E+09    1.00   32500.0  !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjB=c9h18rDqB                      5.700E+08    1.00   25000.0  !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjB=c9h18rEqB                      9.900E+07    1.00   22000.0  !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjB=c9h18rFqB                      1.700E+07    1.00   21000.0  !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qjC=c9h18rAqC                      8.600E+08    1.00   28000.0  !
6-member ring, 3 primary H atoms
c9h19qjC=c9h18rBqC                      3.300E+09    1.00   32500.0  !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjC=c9h18rDqC                      3.300E+09    1.00   32500.0  !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjC=c9h18rEqC                      5.700E+08    1.00   25000.0  !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjC=c9h18rFqC                      9.900E+07    1.00   22000.0  !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjC=c9h18rGqC                      1.700E+07    1.00   21000.0  !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qjD=c9h18rAqD                      1.500E+08    1.00   25000.0  !
7-member ring, 3 primary H atoms
c9h19qjD=c9h18rBqD                      5.700E+08    1.00   25000.0  !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjD=c9h18rCqD                      3.300E+09    1.00   32500.0  !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjD=c9h18rEqD                      3.300E+09    1.00   32500.0  !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjD=c9h18rFqD                      5.700E+08    1.00   25000.0  !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjD=c9h18rGqD                      9.900E+07    1.00   22000.0  !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c9h19qjD=c9h18rHqD                      1.700E+07    1.00   21000.0  !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qjE=c9h18rAqE                      5.100E+07    1.00   24000.0  !
8-member ring, 6 primary H atoms
c9h19qjE=c9h18rBqE                      2.000E+08    1.00   22000.0  !
7-member ring, 4 secondary H atoms
c9h19qjE=c9h18rCqE                      1.100E+09    1.00   25000.0  !
6-member ring, 4 secondary H atoms
c9h19qjE=c9h18rDqE                      6.700E+09    1.00   32500.0  !
5-member ring, 4 secondary H atoms

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
!    ROOH formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h19qjA+ho2=c9h19qA+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c9h19qjD+ho2=c9h19qB+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c9h19qjE+ho2=c9h19qC+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c9h19qjC+ho2=c9h19qD+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c9h19qjB+ho2=c9h19qE+o2                 2.900E+11    0.00    1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran

c9h19qjA+h2o2=c9h19qA+ho2               2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c9h19qjB+h2o2=c9h19qB+ho2               2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c9h19qjC+h2o2=c9h19qC+ho2               2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c9h19qjD+h2o2=c9h19qD+ho2               2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c9h19qjE+h2o2=c9h19qE+ho2               2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour

c9h19qjA+ho2=c9h19ojA+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0
c9h19qjB+ho2=c9h19ojB+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0
c9h19qjC+ho2=c9h19ojC+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0
c9h19qjD+ho2=c9h19ojD+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0
c9h19qjE+ho2=c9h19ojE+oh+o2             1.000E+11    0.00       0.0

c9h19qjA+ch3o2=c9h19ojA+ch3o+o2         1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c9h19qjB+ch3o2=c9h19ojB+ch3o+o2         1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c9h19qjC+ch3o2=c9h19ojC+ch3o+o2         1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c9h19qjD+ch3o2=c9h19ojD+ch3o+o2         1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c9h19qjE+ch3o2=c9h19ojE+ch3o+o2         1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009

c9h19qjA+c9h19qjA=c9h19ojA+c9h19ojA+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjA+c9h19qjB=c9h19ojA+c9h19ojB+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjA+c9h19qjC=c9h19ojA+c9h19ojC+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjA+c9h19qjD=c9h19ojA+c9h19ojD+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjA+c9h19qjE=c9h19ojA+c9h19ojE+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjB+c9h19qjB=c9h19ojB+c9h19ojB+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjB+c9h19qjC=c9h19ojC+c9h19ojB+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjB+c9h19qjD=c9h19ojD+c9h19ojB+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjB+c9h19qjE=c9h19ojE+c9h19ojB+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjC+c9h19qjC=c9h19ojC+c9h19ojC+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjC+c9h19qjD=c9h19ojC+c9h19ojD+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjC+c9h19qjE=c9h19ojC+c9h19ojE+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjD+c9h19qjD=c9h19ojD+c9h19ojD+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjD+c9h19qjE=c9h19ojD+c9h19ojE+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c9h19qjE+c9h19qjE=c9h19ojE+c9h19ojE+o2            1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009


!#####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h18rXqjY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#####################

!***************************
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c9h18rYqX+o2=c9h18qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h18rBqA+o2=c9h18qjBqA                 1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c9h18rCqA+o2=c9h18qjCqA                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rDqA+o2=c9h18qjDqA                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rEqA+o2=c9h18qjEqA                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c9h18rAqB+o2=c9h18qjAqB                 9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c9h18rCqB+o2=c9h18qjCqB                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rDqB+o2=c9h18qjDqB                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rEqB+o2=c9h18qjEqB                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rFqB+o2=c9h18qjFqB                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c9h18rAqC+o2=c9h18qjAqC                 9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c9h18rBqC+o2=c9h18qjBqC                 1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c9h18rDqC+o2=c9h18qjDqC                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rEqC+o2=c9h18qjEqC                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rFqC+o2=c9h18qjFqC                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rGqC+o2=c9h18qjGqC                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c9h18rAqD+o2=c9h18qjAqD                 9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c9h18rBqD+o2=c9h18qjBqD                 1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c9h18rCqD+o2=c9h18qjCqD                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rEqD+o2=c9h18qjEqD                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rFqD+o2=c9h18qjFqD                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rGqD+o2=c9h18qjGqD                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rHqD+o2=c9h18qjHqD                 1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

c9h18rAqE+o2=c9h18qjAqE                 9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c9h18rBqE+o2=c9h18qjBqE                 1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c9h18rCqE+o2=c9h18qjCqE                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c9h18rDqE+o2=c9h18qjDqE                 1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c9h18rAqC=>oh+c2h4+c6h13hco             5.000E+13  0.00  25500.0  !
!c9h18rCqA=>oh+ch2o+c8h16-1              5.000E+13  0.00  25500.0  !
```

```
!c9h18rBqD=>oh+c3h6+c5h11hco            5.000E+13  0.00  25500.0  !
!c9h18rDqB=>oh+ch3hco+c7h14-1           5.000E+13  0.00  25500.0  !
!c9h18rCqE=>oh+c4h8+nc4h9hco            5.000E+13  0.00  25500.0  !
!c9h18rEqC=>oh+ethco+c6h12-1            5.000E+13  0.00  25500.0  !

c9h18rCqA=oh+ch2o+c8h16-1              1.680E+15   -0.24   29180.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h18rDqB=oh+ch3hco+c7h14-1            3.090E+17   -0.93   29019.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h18rAqC=oh+c2h4+c6h13hco             4.010E+15   -0.425  28648.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=1.3E+04.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h18rEqC=oh+ethco+c6h12-1             1.090E+17   -0.78   28379.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h18rBqD=oh+c3h6+c5h11hco             5.960E+14   -0.09   27833.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h18rFqD=oh+c5h10+nc3h7hco            3.110E+16   -0.615  28187.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c9h18rCqE=oh+c4h8+nc4h9hco             7.250E+15   -0.415  27996.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
!   (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c9h18rBqA=oh+c9h18o-AB                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c9h18rCqA=oh+c9h18o-AC                2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c9h18rDqA=oh+c9h18o-AD                2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c9h18rEqA=oh+c9h18o-AE                1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c9h18rAqB=oh+c9h18o-AB                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c9h18rCqB=oh+c9h18o-BC                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c9h18rDqB=oh+c9h18o-BD                2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c9h18rEqB=oh+c9h18o-BE                2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c9h18rFqB=oh+c9h18o-BF                1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c9h18rAqC=oh+c9h18o-AC                2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
```

```
!c9h18rBqC=oh+c9h18o-BC                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c9h18rDqC=oh+c9h18o-CD                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c9h18rEqC=oh+c9h18o-CE                2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c9h18rFqC=oh+c9h18o-CF                2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c9h18rGqC=oh+c9h18o-CG                1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c9h18rAqD=oh+c9h18o-AD                2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c9h18rBqD=oh+c9h18o-BD                2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c9h18rCqD=oh+c9h18o-CD                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c9h18rEqD=oh+c9h18o-DE                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c9h18rFqD=oh+c9h18o-DF                2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c9h18rGqD=oh+c9h18o-CF                2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c9h18rHqD=oh+c9h18o-BF                1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c9h18rAqE=oh+c9h18o-AE                1.500E+08    0.00    1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c9h18rBqE=oh+c9h18o-BE                2.100E+08    0.00    6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c9h18rCqE=oh+c9h18o-CE                2.500E+10    0.00   15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c9h18rDqE=oh+c9h18o-DE                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2

c9h18rBqA=oh+c9h18o-AB                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c9h18rCqA=oh+c9h18o-AC                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c9h18rDqA=oh+c9h18o-AD                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c9h18rEqA=oh+c9h18o-AE                1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c9h18rAqB=oh+c9h18o-AB                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
```

```
c9h18rCqB=oh+c9h18o-BC                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c9h18rDqB=oh+c9h18o-BD                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c9h18rEqB=oh+c9h18o-BE                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c9h18rFqB=oh+c9h18o-BF                1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c9h18rAqC=oh+c9h18o-AC                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c9h18rBqC=oh+c9h18o-BC                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c9h18rDqC=oh+c9h18o-CD                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c9h18rEqC=oh+c9h18o-CE                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c9h18rFqC=oh+c9h18o-CF                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c9h18rGqC=oh+c9h18o-CG                1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c9h18rAqD=oh+c9h18o-AD                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c9h18rBqD=oh+c9h18o-BD                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c9h18rCqD=oh+c9h18o-CD                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c9h18rEqD=oh+c9h18o-DE                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c9h18rFqD=oh+c9h18o-DF                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c9h18rGqD=oh+c9h18o-CF                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c9h18rHqD=oh+c9h18o-BF                1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c9h18rAqE=oh+c9h18o-AE                1.700E+08    0.00    1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
c9h18rBqE=oh+c9h18o-BE                3.600E+09    0.00    7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c9h18rCqE=oh+c9h18o-CE                9.100E+10    0.00   16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c9h18rDqE=oh+c9h18o-DE                2.950E+11    0.00   22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
!    alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

ho2+c9h18-1=c9h18rAqB                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c9h18-1=c9h18rBqA                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c9h18-2=c9h18rBqC                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
```

```
ho2+c9h18-2=c9h18rCqB                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c9h18-3=c9h18rCqD                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c9h18-3=c9h18rDqC                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c9h18-4=c9h18rEqD                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c9h18-4=c9h18rDqE                 1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h18qjXqY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!**************************
! ketohydroperoxides formation
!**************************

!c9h18qjBqA=>oh+c9h17oAqB                 3.350E+09    1.00   32500.0
! 5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c9h18qjCqA=>oh+c9h17oAqC                 5.750E+08    1.00   25000.0
! 6-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c9h18qjDqA=>oh+c9h17oAqD                 9.890E+07    1.00   22000.0
! 7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c9h18qjEqA=>oh+c9h17oAqE                 1.700E+07    1.00   21000.0
! 8-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

!c9h18qjAqB=>oh+c9h17oBqA                 1.675E+09    1.00   29500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjCqB=>oh+c9h17oBqC                 1.675E+09    1.00   29500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjDqB=>oh+c9h17oBqD                 2.875E+08    1.00   22000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjEqB=>oh+c9h17oBqE                 4.945E+07    1.00   19000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjFqB=>oh+c9h17oBqF                 8.495E+06    1.00   18000.0
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c9h18qjAqC=>oh+c9h17oCqA                 2.875E+08    1.00   22000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjBqC=>oh+c9h17oCqB                 1.675E+09    1.00   29500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjDqC=>oh+c9h17oCqD                 1.675E+09    1.00   29500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjEqC=>oh+c9h17oCqE                 2.875E+08    1.00   22000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjFqC=>oh+c9h17oCqF                 4.945E+07    1.00   19000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjGqC=>oh+c9h17oCqG                 8.495E+06    1.00   18000.0
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c9h18qjAqD=>oh+c9h17oDqA                 4.945E+07    1.00   19000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjBqD=>oh+c9h17oDqB                 2.875E+08    1.00   22000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjCqD=>oh+c9h17oDqC                 1.675E+09    1.00   29500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjEqD=>oh+c9h17oDqE                 1.675E+09    1.00   29500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjFqD=>oh+c9h17oDqF                 2.875E+08    1.00   22000.0
```

```
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjGqD=>oh+c9h17oDqG                4.945E+07    1.00   19000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjHqD=>oh+c9h17oDqH                8.495E+06    1.00   18000.0
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c9h18qjAqE=>oh+c9h17oEqA                 8.495E+06    1.00   18000.0
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjBqE=>oh+c9h17oEqB                 4.945E+07    1.00   19000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjCqE=>oh+c9h17oEqC                 2.875E+08    1.00   22000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c9h18qjDqE=>oh+c9h17oEqD                 1.675E+09    1.00   29500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c9h18qjBqA=>oh+c9h17oAqB                  3.350E+09    1.00   33500.0
! 5-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c9h18qjCqA=>oh+c9h17oAqC                  5.750E+08    1.00   26000.0
! 6-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c9h18qjDqA=>oh+c9h17oAqD                  9.890E+07    1.00   23000.0
! 7-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c9h18qjEqA=>oh+c9h17oAqE                  1.700E+07    1.00   22000.0
! 8-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol

c9h18qjAqB=>oh+c9h17oBqA                  1.675E+09    1.00   30500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjCqB=>oh+c9h17oBqC                  1.675E+09    1.00   30500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjDqB=>oh+c9h17oBqD                  2.875E+08    1.00   23000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjEqB=>oh+c9h17oBqE                  4.945E+07    1.00   22000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjFqB=>oh+c9h17oBqF                  8.495E+06    1.00   19000.0
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c9h18qjAqC=>oh+c9h17oCqA                  2.875E+08    1.00   23000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjBqC=>oh+c9h17oCqB                  1.675E+09    1.00   30500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjDqC=>oh+c9h17oCqD                  1.675E+09    1.00   30500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjEqC=>oh+c9h17oCqE                  2.875E+08    1.00   23000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjFqC=>oh+c9h17oCqF                  4.945E+07    1.00   20000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjGqC=>oh+c9h17oCqG                  8.495E+06    1.00   19000.0
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c9h18qjAqD=>oh+c9h17oDqA                  4.945E+07    1.00   20000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjBqD=>oh+c9h17oDqB                  2.875E+08    1.00   23000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjCqD=>oh+c9h17oDqC                  1.675E+09    1.00   30500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjEqD=>oh+c9h17oDqE                  1.675E+09    1.00   30500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjFqD=>oh+c9h17oDqF                  2.875E+08    1.00   23000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjGqD=>oh+c9h17oDqG                  4.945E+07    1.00   20000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjHqD=>oh+c9h17oDqH                  8.495E+06    1.00   19000.0
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c9h18qjAqE=>oh+c9h17oEqA                  8.495E+06    1.00   19000.0
```

```
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjBqE=>oh+c9h17oEqB                  4.945E+07    1.00   20000.0
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjCqE=>oh+c9h17oEqC                  2.875E+08    1.00   23000.0
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c9h18qjDqE=>oh+c9h17oEqD                  1.675E+09    1.00   30500.0
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h17oq REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

!*********************************
! Ketohydroperoxide decomposition
!*********************************

!c9h17oAqB=oh+hco+c7h15hco                1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oAqC=oh+ch2hco+c6h13hco             1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oAqD=oh+ch2ch2hco+c5h11hco          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oAqE=oh+c3h6cho-1+nc4h9hco          1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c9h17oBqA=oh+ch2o+c7h15co                1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oBqC=oh+ch3co+c6h13hco              1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oBqD=oh+ch2cosch3+c5h11hco          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oBqE=oh+ch3cosch2h4p+nc4h9hco       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oBqF=oh+c3h6cosch3-1+nc3h7hco       1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c9h17oCqA=oh+ch2o+nc6h13cosch2           1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oCqB=oh+ch3hco+c6h13co              1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oCqD=oh+c2h5co+c5h11hco             1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oCqE=oh+c2h5cosch2+nc4h9hco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oCqF=oh+c2h5cosch2h4p+nc3h7hco      1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oCqG=oh+c2h5cosch3h6-1+ethco        1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c9h17oDqA=oh+ch2o+nc5h11cosch2h4p        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oDqB=oh+ch3hco+nc5h11cosch2         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oDqC=oh+ethco+c5h11co               1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oDqE=oh+nc4h9hco+c3h7co             1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oDqF=oh+nc3h7cosch2+nc3h7hco        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oDqG=oh+nc3h7cosch2h4p+ethco        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oDqH=oh+nc3h7cosch3h6-1+ch3hco      1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c9h17oEqA=oh+ch2o+nc4h9cosch3h6-1        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oEqB=oh+ch3hco+nc4h9cosch2h4p       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oEqC=oh+ethco+nc4h9cosch2           1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c9h17oEqD=oh+nc4h9co+nc3h7hco            1.000E+16    0.00   44500.0 !

c9h17oAqB=oh+hco+c7h15hco                1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oAqC=oh+ch2hco+c6h13hco             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oAqD=oh+ch2ch2hco+c5h11hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oAqE=oh+c3h6cho-1+nc4h9hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !

c9h17oBqA=oh+ch2o+c7h15co                1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oBqC=oh+ch3co+c6h13hco              1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oBqD=oh+ch2cosch3+c5h11hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oBqE=oh+ch3cosch2h4p+nc4h9hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oBqF=oh+c3h6cosch3-1+nc3h7hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !

c9h17oCqA=oh+ch2o+nc6h13cosch2           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oCqB=oh+ch3hco+c6h13co              1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oCqD=oh+c2h5co+c5h11hco             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oCqE=oh+c2h5cosch2+nc4h9hco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
```

```
c9h17oCqF=oh+c2h5cosch2h4p+nc3h7hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oCqG=oh+c2h5cosch3h6-1+ethco         1.500E+16    0.00   44500.0 !

c9h17oDqA=oh+ch2o+nc5h11cosch2h4p         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oDqB=oh+ch3hco+nc5h11cosch2          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oDqC=oh+ethco+c5h11co                1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oDqE=oh+nc4h9hco+c3h7co              1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oDqF=oh+nc3h7cosch2+nc3h7hco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oDqG=oh+nc3h7cosch2h4p+ethco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oDqH=oh+nc3h7cosch3h6-1+ch3hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !

c9h17oEqA=oh+ch2o+nc4h9cosch3h6-1         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oEqB=oh+ch3hco+nc4h9cosch2h4p        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oEqC=oh+ethco+nc4h9cosch2            1.500E+16    0.00   44500.0 !
c9h17oEqD=oh+nc4h9co+nc3h7hco             1.500E+16    0.00   44500.0 !


!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h18o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

!*********************************
! O-ring decomposition
!*********************************

c9h18o-AB+h=>h2+acrol+Ac6h13            4.800E+08    1.50    2785.0 !
c9h18o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac6h13          2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac6h13        2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AB+h=>h2+ch2co+Ac7h15            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac7h15          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac7h15        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BC+h=>h2+mvk+Ac5h11              2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac5h11            1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac5h11          1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac6h13          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac6h13        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac6h13      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CD+h=>h2+c2h5cosch3+pc4h9        2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-CD+oh=>h2o+c2h5cosch3+pc4h9      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-CD+ho2=>h2o2+c2h5cosch3+pc4h9    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CD+h=>h2+ch3+c2h3cosch5ll        2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3cosch5ll      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3cosch5ll    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-DE+h=>h2+c2h3cosch3h7+nc3h7      2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-DE+oh=>h2o+c2h3cosch3h7+nc3h7    1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-DE+ho2=>h2o2+c2h3cosch3h7+nc3h7  1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3cosch4h9       2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3cosch4h9     1.200E+06    2.00   -1192.0 !
```

```
c9h18o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3cosch4h9   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AC+h=>h2+c8h16-1+hco             4.800E+08    1.50    2785.0 !
c9h18o-AC+oh=>h2o+c8h16-1+hco           2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AC+ho2=>h2o2+c8h16-1+hco         2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AC+h=>h2+c2h4+c6h13co            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-AC+oh=>h2o+c2h4+c6h13co          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c6h13co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BD+h=>h2+ch3co+c7h14-1           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BD+oh=>h2o+ch3co+c7h14-1         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c7h14-1       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BD+h=>h2+c3h6+c5h11co            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BD+oh=>h2o+c3h6+c5h11co          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c5h11co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CE+h=>h2+c6h12-1+c2h5co          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-CE+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5co        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-CE+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5co      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CE+h=>h2+c4h8+nc4h9co            2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-CE+oh=>h2o+c4h8+nc4h9co          1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9co        1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-DF+h=>h2+c5h10+c3h7co            4.800E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-DF+oh=>h2o+c5h10+c3h7co          2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+c3h7co        2.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AD+h=>h2+c2h4+nc5h11cosch2       4.800E+08    1.50    2785.0 !
c9h18o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc5h11cosch2     2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11cosch2   2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AD+h=>h2+c7h14-1+ch2hco          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-AD+oh=>h2o+c7h14-1+ch2hco        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AD+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2hco      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BE+h=>h2+c6h12-1+ch2cosch3       2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BE+oh=>h2o+c6h12-1+ch2cosch3     1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BE+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch2cosch3   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BE+h=>h2+c3h6+nc4h9cosch2        2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc4h9cosch2      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9cosch2    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c9h18o-CF+h=>h2+c5h10+c2h5cosch2        2.400E+08    1.50    2005.0 !
!c9h18o-CF+oh=>h2o+c5h10+c2h5cosch2      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
!c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c5h10+c2h5cosch2    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c9h18o-CF+h=>h2+c4h8+nc3h7cosch2        2.400E+08    1.50    2005.0 !
```

```
!c9h18o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc3h7coch2      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
!c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7coch2    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AE+h=>h2+c6h12-1+ch2ch2hco      4.800E+08    1.50    2785.0 !
c9h18o-AE+oh=>h2o+c6h12-1+ch2ch2hco    2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch2ch2hco  2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AE+h=>h2+c2h4+nc4h9coc2h4p      2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc4h9coc2h4p    1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc4h9coc2h4p  1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BF+h=>h2+c5h10+ch3coc2h4p       2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BF+oh=>h2o+c5h10+ch3coc2h4p     1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c5h10+ch3coc2h4p   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BF+h=>h2+c3h6+nc3h7coc2h4p      2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc3h7coc2h4p    1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc3h7coc2h4p  1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CG+h=>h2+c4h8+c2h5coc2h4p       4.800E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-CG+oh=>h2o+c4h8+c2h5coc2h4p     2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5coc2h4p   2.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CF+h=h2+c2h5coc6h12-4           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-CF+oh=h2o+c2h5coc6h12-4         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-CF+ho2=h2o2+c2h5coc6h12-4       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CF+h=h2+c3h7coc5h10-3           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c9h18o-CF+oh=h2o+c3h7coc5h10-3         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c9h18o-CF+ho2=h2o2+c3h7coc5h10-3       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c2h5coc6h12-4=c5h10+c2h5coch2          2.000E+13    0.00    28700.0
c2h5coc6h12-4+o2=non3*o6oo             1.800E+19   -2.50        0.0
non3*o6oo=non3*o4j6ooh                 5.750E+08    1.00    22000.0
non3*o4j6ooh+o2=non3*o4oo6ooh          1.200E+10    0.00    -2300.0
non3*o4oo6ooh=oh+non3*o6*o4ooh         2.875E+08    1.00    23000.0 !
E-2000
non3*o6*o4ooh=oh+c2h5co+c6ald3oxo      1.500E+16    0.00    44500.0

c3h7coc5h10-3=c4h8+nc3h7coch2          2.000E+13    0.00    28700.0
c3h7coc5h10-3+o2=non4*o7oo             1.800E+19   -2.50        0.0
non4*o7oo=non4*o5j7ooh                 5.750E+08    1.00    22000.0
non4*o5j7ooh+o2=non4*o5oo7ooh          1.200E+10    0.00    -2300.0
non4*o5oo7ooh=oh+non4*o7*o5ooh         2.875E+08    1.00    23000.0 !
E-2000
non4*o7*o5ooh=oh+c3h7co+c5ald3oxo      1.500E+16    0.00    44500.0


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h18 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
! 5) decomposition by R
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!


!********************************
! 1) addition of H and CH3
! 2) addition of OH
! 3) addition of O
! 4) addition of ho2
! 5) decomposition by R
!********************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) addition of H and CH3
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h18-1+ch3=Ac7h15+c3h6                 9.600E+10  0.00  8000.0  ! ROL
5188

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition of OH
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c9h18-1+oh=ch3+c7h15hco                 1.000E+12   0.00        0.0
!
c9h18-1+oh=ch2o+Ac8h17                    1.000E+11    0.00   -4000.0
! Westbrook 2009

c9h18-2+oh=c2h5+c6h13hco                1.000E+12   0.00        0.0  !
c9h18-2+oh=ch3hco+Ac7h15                1.000E+12   0.00        0.0  !

c9h18-3+oh=nc3h7+c5h11hco               1.000E+12   0.00        0.0  !
c9h18-3+oh=ethco+Ac6h13                 1.000E+12   0.00        0.0  !

c9h18-4+oh=pc4h9+nc4h9hco               1.000E+12   0.00        0.0  !
c9h18-4+oh=nc3h7hco+Ac5h11              1.000E+12   0.00        0.0  !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) addition of o
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h18-1+o=ch2o+c8h16-1                  1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009
c9h18-2+o=ch3hco+c7h14-1                1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009
c9h18-2+o=c2h4+c6h13hco                 1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009
c9h18-3+o=ethco+c6h12-1                 1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009
c9h18-3+o=c3h6+c5h11hco                 1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009
c9h18-4+o=nc3h7hco+c5h10                1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009
c9h18-4+o=c4h8+nc4h9hco                 1.000E+11    0.00   -1050.0 !
Westbrook 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) decomposition by R
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h18-1+h=h2+Cc9h17-1                   6.550E+12    0.00    4445.0 !
idem 1-hexene
c9h18-1+oh=h2o+Cc9h17-1                 4.186E+06    2.00    -543.0 !
```

```
idem c4h8
c9h18-1+ho2=h2o2+Cc9h17-1               6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c9h18-1+ch3=ch4+Cc9h17-1                2.000E+11    0.00    6800.0 !
idem 1-hexene
c9h18-1+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1           2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-1+c2h5=c2h6+Cc9h17-1              1.000E+11    0.00    8300.0 !
idem 1-hexene
c9h18-1+o=oh+Cc9h17-1                   4.000E+13    0.00    4000.0 !
idem 1-hexene
c9h18-1+nc3h7=c3h8+Cc9h17-1             1.000E+11    0.00    8300.0 !
idem 1-hexene
c9h18-1+c2h3=c2h4+Cc9h17-1              2.000E+11    0.00    6800.0 !
idem 1-hexene

c9h18-1+oh=h2o+c5h8-14+pc4h9            1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c9h18-1+oh=h2o+c6h12-1+ac3h5            1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c9h18-1+oh=h2o+c5h10+Dc4h7-1            1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c9h18-1+oh=h2o+c4h8+Ec5h9-1             1.125E+06    2.00   -1391.0 !
idem n-alkanes
c9h18-1+oh=h2o+c3h6+Fc6h11-1            1.000E+06    2.00    -597.0 !
idem n-alkanes


c9h18-2+h=h2+Cc9h17-1                   1.700E+05    2.50    2490.0 !
c9h18-2+oh=h2o+Cc9h17-1                 3.100E+06    2.00    -300.0 !
c9h18-2+ho2=h2o2+Cc9h17-1               6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c9h18-2+ch3=ch4+Cc9h17-1                2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1           2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-2+c2h5=c2h6+Cc9h17-1              2.200E+00    3.50    6835.0 !
c9h18-2+o=oh+Cc9h17-1                   6.000E+10    0.70    7682.0 !

c9h18-2+h=h2+Dc9h17-2                   1.700E+05    2.50    2490.0 !
c9h18-2+oh=h2o+Dc9h17-2                 3.100E+06    2.00    -300.0 !
c9h18-2+ho2=h2o2+Dc9h17-2               6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c9h18-2+ch3=ch4+Dc9h17-2                2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2           2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-2+c2h5=c2h6+Dc9h17-2              2.200E+00    3.50    6835.0 !
c9h18-2+o=oh+Dc9h17-2                   6.000E+10    0.70    7682.0 !

c9h18-3+h=h2+Dc9h17-2                   1.700E+05    2.50    2490.0 !
c9h18-3+oh=h2o+Dc9h17-2                 3.100E+06    2.00    -300.0 !
c9h18-3+ho2=h2o2+Dc9h17-2               6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c9h18-3+ch3=ch4+Dc9h17-2                2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2           2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-3+c2h5=c2h6+Dc9h17-2              2.200E+00    3.50    6835.0 !
c9h18-3+o=oh+Dc9h17-2                   6.000E+10    0.70    7682.0 !

c9h18-3+h=h2+Ec9h17-3                   1.700E+05    2.50    2490.0 !
c9h18-3+oh=h2o+Ec9h17-3                 3.100E+06    2.00    -300.0 !
c9h18-3+ho2=h2o2+Ec9h17-3               6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c9h18-3+ch3=ch4+Ec9h17-3                2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3           2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-3+c2h5=c2h6+Ec9h17-3              2.200E+00    3.50    6835.0 !
c9h18-3+o=oh+Ec9h17-3                   6.000E+10    0.70    7682.0 !

c9h18-4+h=h2+Ec9h17-3                   1.700E+05    2.50    2490.0 !
```

```
c9h18-4+oh=h2o+Ec9h17-3                 3.100E+06    2.00    -300.0 !
c9h18-4+ho2=h2o2+Ec9h17-3               6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c9h18-4+ch3=ch4+Ec9h17-3                2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3           2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-4+c2h5=c2h6+Ec9h17-3              2.200E+00    3.50    6835.0 !
c9h18-4+o=oh+Ec9h17-3                   6.000E+10    0.70    7682.0 !

c9h18-4+h=h2+Fc9h17-4                   1.700E+05    2.50    2490.0 !
c9h18-4+oh=h2o+Fc9h17-4                 3.100E+06    2.00    -300.0 !
c9h18-4+ho2=h2o2+Fc9h17-4               6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c9h18-4+ch3=ch4+Fc9h17-4                2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Fc9h17-4           2.200E+00    3.50    5675.0 !
c9h18-4+c2h5=c2h6+Fc9h17-4              2.200E+00    3.50    6835.0 !
c9h18-4+o=oh+Fc9h17-4                   6.000E+10    0.70    7682.0 !


Cc9h17-1=c4h6+Ac5h11                    1.339E+15   -0.52   38320.0 !
Curran
Cc9h17-1+h=c9h18-1                      1.000E+13    0.00       0.0 !
Cc9h17-1+ho2=oh+acrol+Ac6h13            1.000E+12    0.00    8000.0 !

Dc9h17-2=c5h8-13+pc4h9                  2.500E+13    0.00   35000.0 !
Ec9h17-3=c6h10-13+nc3h7                 2.500E+13    0.00   35000.0 !
Fc9h17-4=c7h12-13+c2h5                  2.500E+13    0.00   35000.0 !

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c9h16 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

Dc4h7-1+Ec5h9-1=c9h16                   1.000E+13  0.00      0.0  !
TER 5473

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! nonanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

c8h17hco+h=h2+c8h17co                   4.000E+13  0.00   4200.0  !
ALD 5362
c8h17hco+oh=h2o+c8h17co                 4.200E+12  0.00    500.0  !
ALD 5363
c8h17hco+ho2=h2o2+c8h17co               1.000E+12  0.00  10000.0  !
ALD 5364
c8h17hco+ch3=ch4+c8h17co                2.000E-06  5.60   2500.0  !
ALD 5365
c8h17hco+c2h5=c2h6+c8h17co              1.300E+12  0.00   8500.0  !
ALD 5366

c8h17co=>co+Ac8h17                      2.000E+13  0.00  28700.0  !
COR 5378
c8h17co+ho2=>co2+oh+Ac8h17              2.000E+13  0.00      0.0  !

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! nonanone REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

nonanone+h=>h2+ch2co+ch3+3c2h4          2.700E+07  2.00   5000.0  !
```

```
FCO 5438
nonanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+3c2h4       7.800E+06  2.00   -765.0  !
FCO 5439
nonanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+3c2h4     1.200E+12  0.00  15500.0  !
FCO 5440
nonanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+3c2h4      6.000E+11  0.00   9600.0  !
FCO 5441
nonanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+3c2h4 6.000E+11  0.00   9600.0  !
FCO 5442
nonanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+3c2h4    6.000E+11  0.00  11000.0  !
FCO 5443


!###############################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! Non-1-enal c8h15hco reactions
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!###############################

c8h15hco=Hc8h15-1+hco                  7.250E+16    0.00   82400.0 !
idem ethco
c8h15hco+o2=c8h15co+ho2                2.000E+13    0.50   42200.0 !
idem ethco
c8h15hco+ho2=c8h15co+h2o2              1.700E+12    0.00   10700.0 !
idem ethco
c8h15hco+oh=c8h15co+h2o                2.350E+10    0.73   -1113.0 !
idem ethco
c8h15hco+o=c8h15co+oh                  5.850E+12    0.00    1808.0 !
idem ethco
c8h15hco+h=c8h15co+h2                  5.540E+02    3.50    5167.0 !
idem ethco
c8h15hco+ch3=c8h15co+ch4               2.250E+00    4.00    8285.0 !
idem ethco
c8h15hco+c2h5=c8h15co+c2h6             1.640E+00    3.65    9141.0 !
idem ethco
c8h15hco+hco=c8h15co+ch2o              4.700E+04    2.72   18235.0 !
idem ethco
c8h15hco+c2h3=c8h15co+c2h4             8.500E+09    0.0     6000.0 !
idem ethco


c8h15co=Hc8h15-1+co                    2.000E+13    0.00   28700.0 !
idem ethco Konnov
c8h15co+ho2=>co2+oh+Hc8h15-1           2.000E+13    0.00       0.0  !

!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€     SOUS-mECANISmE N-DECANE
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! INITIATION REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
```

```
!***************************
! Unimolecular initiation
!1) nc10h22=R1+R2
!2) nc10h22=h+c10h21
!***************************


nc10h22=Ac5h11+Ac5h11                    2.000E+17    0.00   83180.0 !
Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595
nc10h22=pc4h9+Ac6h13                     2.000E+17    0.00   83180.0 !
Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595
nc10h22=nc3h7+Ac7h15                     2.000E+17    0.00   83400.0 !
Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595
nc10h22=c2h5+Ac8h17                      2.000E+17    0.00   83680.0 !
Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595
nc10h22=ch3+Ac9h19                       2.000E+17    0.00   85570.0 !
Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595

!nc10h22=h+Ac10h21                        1.000E+15    0.00  100000.0
! mati
!nc10h22=h+Bc10h21                        1.000E+15    0.00  100000.0
! mati
!nc10h22=h+Cc10h21                        1.000E+15    0.00  100000.0
! mati
!nc10h22=h+Dc10h21                        1.000E+15    0.00  100000.0
! mati
!nc10h22=h+Ec10h21                        1.000E+15    0.00  100000.0
! mati

nc10h22=h+Ac10h21                        1.100E+14    0.785  96940.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc10h22=h+Bc10h21                        3.410E+15    0.289  97203.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc10h22=h+Cc10h21                        3.750E+15    0.277  97191.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc10h22=h+Dc10h21                        3.750E+15    0.277  97191.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc10h22=h+Ec10h21                        3.750E+15    0.277  97191.0 !
estimated fron reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
COmb. Flame vol. 156 pp. 181-199

!***************************
! Bimolecular initiation
!
!nc10h22+o2=ho2+c10h21
!***************************
nc10h22+o2=ho2+Ac10h21                   4.000E+13   0.000    50870.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc10h22+o2=ho2+Bc10h21                   8.000E+13   0.000    47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc10h22+o2=ho2+Cc10h21                   8.000E+13   0.000    47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc10h22+o2=ho2+Dc10h21                   8.000E+13   0.000    47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc10h22+o2=ho2+Ec10h21                   8.000E+13   0.000    47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
```

```
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! mETAhTESIS REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!***************************
! metathesis reactions
! nc10h22+X=hX+c10h21
! X= oh, ho2, h, o, ch3, c2h5, c2h3
! ac3h5, sc3h5, tc3h5, hco, ch3o
!***************************

nc10h22+oh=h2o+Ac10h21                 1.410E+07    1.80      973.7  !
mati
nc10h22+oh=h2o+Bc10h21                 1.990E+06    2.00     -596.2  !
mati
nc10h22+oh=h2o+Cc10h21                 2.250E+06    2.00    -1391.0  !
mati
nc10h22+oh=h2o+Dc10h21                 2.250E+06    2.00    -1391.0  !
mati
nc10h22+oh=h2o+Ec10h21                 2.250E+06    2.00    -1391.0  !
mati

nc10h22+ho2=h2o2+Ac10h21               3.600E+04    2.50    16683.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc10h22+ho2=h2o2+Bc10h21               4.000E+04    2.50    14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc10h22+ho2=h2o2+Cc10h21               4.000E+04    2.50    14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc10h22+ho2=h2o2+Dc10h21               4.000E+04    2.50    14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc10h22+ho2=h2o2+Ec10h21               4.000E+04    2.50    14208.0  !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365

nc10h22+h=h2+Ac10h21                   5.700E+07    2.00     7700.0  !
mE 2942 CW
nc10h22+h=h2+Bc10h21                   1.800E+07    2.00     5000.0  !
mE 2943 CW
nc10h22+h=h2+Cc10h21                   1.800E+07    2.00     5000.0  !
mE 2944 CW
nc10h22+h=h2+Dc10h21                   1.800E+07    2.00     5000.0  !
mE 2945 CW
nc10h22+h=h2+Ec10h21                   1.800E+07    2.00     5000.0  !
mE 2946 CW

o+nc10h22=oh+Ac10h21                   1.000E+14    0.00     7850.0  !
mE 2937 CW
o+nc10h22=oh+Bc10h21                   5.200E+13    0.00     5200.0  !
mE 2938 CW
o+nc10h22=oh+Cc10h21                   5.200E+13    0.00     5200.0  !
mE 2939 CW
o+nc10h22=oh+Dc10h21                   5.200E+13    0.00     5200.0  !
mE 2940 CW
o+nc10h22=oh+Ec10h21                   5.200E+13    0.00     5200.0  !
mE 2941 CW

nc10h22+ch3=ch4+Ac10h21                6.000E-01    4.00     8200.0  !
mE 2957 CN
nc10h22+ch3=ch4+Bc10h21                4.000E+11    0.00     9600.0  !
mE 2958 CN
nc10h22+ch3=ch4+Cc10h21                4.000E+11    0.00     9600.0  !
mE 2959 CN
nc10h22+ch3=ch4+Dc10h21                4.000E+11    0.00     9600.0  !
mE 2960 CN
```

```
nc10h22+ch3=ch4+Ec10h21                4.000E+11    0.00     9600.0  !
mE 2961 CN

nc10h22+c2h5=c2h6+Ac10h21              6.000E+11    0.00    13500.0  !
mE 2992 CR
nc10h22+c2h5=c2h6+Bc10h21              4.000E+11    0.00    11000.0  !
mE 2993 CN
nc10h22+c2h5=c2h6+Cc10h21              4.000E+11    0.00    11000.0  !
mE 2994 CN
nc10h22+c2h5=c2h6+Dc10h21              4.000E+11    0.00    11000.0  !
mE 2995 CN
nc10h22+c2h5=c2h6+Ec10h21              4.000E+11    0.00    11000.0  !
mE 2996 CN

nc10h22+hco=ch2o+Ac10h21               2.000E+05    2.50    18500.0  !
mE 2962 CN
nc10h22+hco=ch2o+Bc10h21               2.200E+07    1.90    17000.0  !
mE 2963 CN
nc10h22+hco=ch2o+Cc10h21               2.200E+07    1.90    17000.0  !
mE 2964 CN
nc10h22+hco=ch2o+Dc10h21               2.200E+07    1.90    17000.0  !
mE 2965 CN
nc10h22+hco=ch2o+Ec10h21               2.200E+07    1.90    17000.0  !
mE 2966 CN

nc10h22+ch3o=ch3oh+Ac10h21             3.200E+11    0.00    7300.0  !
mE 2972 CN
nc10h22+ch3o=ch3oh+Bc10h21             2.900E+11    0.00    4500.0  !
mE 2973 CN
nc10h22+ch3o=ch3oh+Cc10h21             2.900E+11    0.00    4500.0  !
mE 2974 CN
nc10h22+ch3o=ch3oh+Dc10h21             2.900E+11    0.00    4500.0  !
mE 2975 CN
nc10h22+ch3o=ch3oh+Ec10h21             2.900E+11    0.00    4500.0  !
mE 2976 CN

nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ac10h21            2.000E+02    2.95    14000.0  !
mE 2967 CN
nc10h22+ch2oh=ch3oh+Bc10h21            1.200E+02    2.95    12000.0  !
mE 2968 CN
nc10h22+ch2oh=ch3oh+Cc10h21            1.200E+02    2.95    12000.0  !
mE 2969 CN
nc10h22+ch2oh=ch3oh+Dc10h21            1.200E+02    2.95    12000.0  !
mE 2970 CN
nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ec10h21            1.200E+02    2.95    12000.0  !
mE 2971 CN

nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ac10h21           1.200E+13    0.00    20000.0  !
mE 2977 CN
nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Bc10h21           6.000E+12    0.00    17500.0  !
mE 2978 CN
nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Cc10h21           6.000E+12    0.00    17500.0  !
mE 2979 CN
nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Dc10h21           6.000E+12    0.00    17500.0  !
mE 2980 CN
nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ec10h21           6.000E+12    0.00    17500.0  !
mE 2981 CN

nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ac10h21          6.000E+11    0.00    13700.0  !
mE 3002 CR
nc10h22+ch2hco=ch3hco+Bc10h21          4.000E+11    0.00    11400.0  !
mE 3003 CR
nc10h22+ch2hco=ch3hco+Cc10h21          4.000E+11    0.00    11400.0  !
mE 3004 CR
```

```
nc10h22+ch2hco=ch3hco+Dc10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3005 CR
nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ec10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3006 CR

nc10h22+ch3co=ch3hco+Ac10h21           3.000E+11    0.00   15000.0  !
mE 3007 CR
nc10h22+ch3co=ch3hco+Bc10h21           2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3008 CR
nc10h22+ch3co=ch3hco+Cc10h21           2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3009 CR
nc10h22+ch3co=ch3hco+Dc10h21           2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3010 CR
nc10h22+ch3co=ch3hco+Ec10h21           2.000E+11    0.00   12700.0  !
mE 3011 CR

nc10h22+nc3h7=c3h8+Ac10h21             6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3032 CR
nc10h22+nc3h7=c3h8+Bc10h21             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3033 CR
nc10h22+nc3h7=c3h8+Cc10h21             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3034 CR
nc10h22+nc3h7=c3h8+Dc10h21             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3035 CR
nc10h22+nc3h7=c3h8+Ec10h21             4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3036 CR

nc10h22+pc4h9=c4h10+Ac10h21            6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3037 CR
nc10h22+pc4h9=c4h10+Bc10h21            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3038 CR
nc10h22+pc4h9=c4h10+Cc10h21            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3039 CR
nc10h22+pc4h9=c4h10+Dc10h21            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3040 CR
nc10h22+pc4h9=c4h10+Ec10h21            4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3041 CR

nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ac10h21           6.000E+11    0.00   13700.0
! mE 3042 CR
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Bc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3043 CR
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Cc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3044 CR
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Dc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3045 CR
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ec10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3046 CR

nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ac10h21           6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3047 CR
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Bc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3048 CR
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Cc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3049 CR
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Dc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3050 CR
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ec10h21           4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3051 CR

nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ac10h21           6.000E+11    0.00   13700.0
! mE 3052 CR
nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Bc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3053 CR
```

```
nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Cc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3054 CR
nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Dc10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3055 CR
nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ec10h21           4.000E+11    0.00   11400.0
! mE 3056 CR

nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ac10h21          6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3057 CR
nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Bc10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3058 CR
nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Cc10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3059 CR
nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Dc10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3060 CR
nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ec10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3061 CR

nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ac10h21          6.000E+11    0.00   13700.0  !
mE 3062 CR
nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Bc10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3063 CR
nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Cc10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3064 CR
nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Dc10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3065 CR
nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ec10h21          4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3066 CR

nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ac10h21          6.000E+11    0.00   14700.0  !
mE 3382 CR
nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Bc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3383 CR
nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Cc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3384 CR
nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Dc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3385 CR
nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ec10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3386 CR

nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ac10h21          6.000E+11    0.00   14700.0  !
mE 3177 CR
nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Bc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3178 CR
nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Cc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3179 CR
nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Dc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3180 CR
nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ec10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3181 CR

nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ac10h21          6.000E+11    0.00   14700.0  !
mE 3167 CR
nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Bc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3168 CR
nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Cc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3169 CR
nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Dc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3170 CR
nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ec10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3171 CR

nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ac10h21          6.000E+11    0.00   14700.0  !
mE 3172 CR
```

```
nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Bc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3173 CR
nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Cc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3174 CR
nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Dc10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3175 CR
nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ec10h21          4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3176 CR


nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Bc10h21        4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3067 CR
nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Cc10h21        4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3068 CR
nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Dc10h21        4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3069 CR
nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Ec10h21        4.000E+11    0.00   11400.0  !
mE 3070 CR
nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Cc10h21        4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3072 CR
nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Dc10h21        4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3073 CR
nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Ec10h21        4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3074 CR
nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Dc10h21        4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3077 CR
                                  rev /4.000E+11    0.00   12400.0/
nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Ec10h21        4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3078 CR
                                  rev /4.000E+11    0.00   12400.0/
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ec10h21        4.000E+11    0.00   12400.0  !
mE 3082 CR
                                  rev /4.000E+11    0.00   12400.0/


nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ac10h21     1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 3182 CN
nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Bc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3183 CN
nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Cc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3184 CN
nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Dc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3185 CN
nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ec10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3186 CN
nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ac10h21     1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 3187 CN
nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Bc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3188 CN
nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Cc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3189 CN
nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Dc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3190 CN
nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ec10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3191 CN
nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ac10h21     1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 3192 CN
nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Bc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3193 CN
nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Cc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3194 CN
nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Dc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3195 CN
nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ec10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
```

```
mE 3196 CN
nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ac10h21     1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 3197 CN
nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Bc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3198 CN
nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Cc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3199 CN
nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Dc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3200 CN
nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ec10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3201 CN
nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ac10h21     1.200E+13    0.00   20000.0  !
mE 3202 CN
nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Bc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3203 CN
nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Cc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3204 CN
nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Dc10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3205 CN
nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ec10h21     6.000E+12    0.00   17500.0  !
mE 3206 CN

nc10h22+o2cho=Ac10h21+ho2cho           1.680E+13    0.00   20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc10h22+o2cho=Bc10h21+ho2cho           1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc10h22+o2cho=Cc10h21+ho2cho           1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc10h22+o2cho=Dc10h21+ho2cho           1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc10h22+o2cho=Ec10h21+ho2cho           1.120E+13    0.00   17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004

!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h21 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!***************************
! 1) C-C bond scision
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) decompostion by o, oh and ho2 attack
! 5) isomerisation
! 6) O2 addition
! 7) alkoxy formation
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scision
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac10h21=Ac8h17+c2h4                   2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1707 CW
!Bc10h21=Ac7h15+c3h6                   2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1709 CW
!Cc10h21=Ac6h13+c4h8                   2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1712 CW
!Cc10h21=ch3+c9h18-1                   2.000E+13    0.00   31000.0
! DE 1713 CN
!Dc10h21=Ac5h11+c5h10                  2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1716 CW
!Dc10h21=c2h5+c8h16-1                  2.000E+13    0.00   28700.0
```

```
! DE 1717 CW
!Ec10h21=pc4h9+c6h12-1                  2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1720 CW
!Ec10h21=nc3h7+c7h14-1                  2.000E+13    0.00   28700.0
! DE 1721 CW

Ac10h21=Ac8h17+c2h4                    9.120E+11    0.31   27240.5 !
Tsang et al 2009
Bc10h21=Ac7h15+c3h6                    6.025E+10    0.84   27822.8 !
Tsang et al 2009
Cc10h21=Ac6h13+c4h8                    2.041E+13    0.04   28496.5 !
Tsang et al 2009
Cc10h21=ch3+c9h18-1                    9.550E+09    1.08   29390.7 !
Tsang et al 2009
Dc10h21=Ac5h11+c5h10                   2.041E+13    0.04   28496.5 !
Tsang et al 2009
Dc10h21=c2h5+c8h16-1                   8.510E+09    1.11   27025.9 !
Tsang et al 2009
Ec10h21=pc4h9+c6h12-1                  2.041E+13    0.04   28496.5 !
Tsang et al 2009
Ec10h21=nc3h7+c7h14-1                  5.495E+11    0.55   28087.1 !
Tsang et al 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scission
! c10h21=h+c10h20
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21=h+c10h20-1                     1.990E+13   -0.02   35861.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc10h21=h+c10h20-1                     7.730E+12    0.19   36548.0 !
estimated from reverse constant k=4.24E+11.T^0.51.exp(-1230/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc10h21=h+c10h20-2                     1.080E+13    0.00   35288.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc10h21=h+c10h20-2                     7.470E+12    0.04   35206.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc10h21=h+c10h20-3                     4.030E+12    0.10   35036.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Dc10h21=h+c10h20-3                     4.030E+12    0.10   35039.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Dc10h21=h+c10h20-4                     4.020E+12    0.10   35037.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Ec10h21=h+c10h20-4                     4.020E+12    0.10   35037.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Ec10h21=h+c10h20-5                     2.190E+12    0.095  35055.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
! c10h21+o2=c10h20+ho2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21+o2=c10h20-1+ho2                1.900E+12    0.00    5000.0  !
OX 2576 CN
```

```
Bc10h21+o2=c10h20-1+ho2                8.000E+09    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Bc10h21+o2=c10h20-2+ho2                1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc10h21+o2=c10h20-2+ho2                1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc10h21+o2=c10h20-3+ho2                1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Dc10h21+o2=c10h20-3+ho2                1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Dc10h21+o2=c10h20-4+ho2                1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Ec10h21+o2=c10h20-4+ho2                1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Ec10h21+o2=c10h20-5+ho2                1.800E+10    0.00   -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) decompostion by o, oh
! and ho2 attack
! c10h21+o=alkyl+aldehyde
! c10h21+oh=alkane+aldehyde
! c10h21+ho2=>alkyl+aldehyde+oh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21+o=ch2o+Ac9h19                  2.000e+13    0.00    4000.0 !
Bc10h21+o=ch3hco+Ac8h17                2.000e+13    0.00    4000.0 !
Bc10h21+o=ch3+c8h17hco                 2.000e+13    0.00    4000.0 !
Cc10h21+o=ethco+Ac7h15                 2.000e+13    0.00    4000.0 !
Cc10h21+o=c2h5+c7h15hco                2.000e+13    0.00    4000.0 !
Dc10h21+o=nc3h7+c6h13hco               2.000e+13    0.00    4000.0 !
Dc10h21+o=nc3h7hco+Ac6h13              2.000e+13    0.00    4000.0 !
Ec10h21+o=pc4h9+c5h11hco               2.000e+13    0.00    4000.0 !
Ec10h21+o=nc4h9hco+Ac5h11              2.000e+13    0.00    4000.0 !

Ac10h21+oh=ch2o+nc9h20                 2.000e+13    0.00    4000.0 !
Bc10h21+oh=ch3hco+nc8h18               2.000e+13    0.00    4000.0 !
Bc10h21+oh=ch4+c8h17hco                2.000e+13    0.00    4000.0 !
Cc10h21+oh=ethco+nc7h16                2.000e+13    0.00    4000.0 !
Cc10h21+oh=c2h6+c7h15hco               2.000e+13    0.00    4000.0 !
Dc10h21+oh=c3h8+c6h13hco               2.000e+13    0.00    4000.0 !
Dc10h21+oh=nc3h7hco+c6h14              2.000e+13    0.00    4000.0 !
Ec10h21+oh=c4h10+c5h11hco              2.000e+13    0.00    4000.0 !
Ec10h21+oh=nc4h9hco+nc5h12             2.000e+13    0.00    4000.0 !

Ac10h21+ho2=ch2o+Ac9h19+oh             5.000e+12    0.00       0.0 !
Bc10h21+ho2=ch3hco+Ac8h17+oh           5.000e+12    0.00       0.0 !
Bc10h21+ho2=ch3+c8h17hco+oh            5.000e+12    0.00       0.0 !
Cc10h21+ho2=ethco+Ac7h15+oh            5.000e+12    0.00       0.0 !
Cc10h21+ho2=c2h5+c7h15hco+oh           5.000e+12    0.00       0.0 !
Dc10h21+ho2=nc3h7+c6h13hco+oh          5.000e+12    0.00       0.0 !
Dc10h21+ho2=nc3h7hco+Ac6h13+oh         5.000e+12    0.00       0.0 !
Ec10h21+ho2=pc4h9+c5h11hco+oh          5.000e+12    0.00       0.0 !
Ec10h21+ho2=nc4h9hco+Ac5h11+oh         5.000e+12    0.00       0.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!


!Ac10h21=Cc10h21                         3.030E+09    1.04   38748.6 !
!                                rev / 5.580E+09    0.96   38652.3 /
!Ac10h21=Dc10h21                         5.130E+08    1.04   19047.3 !
```

```
!                                rev / 9.450E+08    0.96   18951.0 /
!Ac10h21=Ec10h21                         5.900E+07    1.10   13697.1 !
!                                rev / 1.090E+08    1.02   13601.3 /
!
!Bc10h21=Cc10h21                         3.020E+06    1.00   22596.0 !
!                                rev / 2.830E+06    1.00   22604.1 /
!Bc10h21=Dc10h21                         6.010E+03    2.07   17926.3 !
!                                rev / 5.650E+03    2.08   17935.2 /
!Bc10h21=Ec10h21                         2.390E+04    2.19   12746.8 !
!                                rev / 2.240E+04    2.20   12755.0 /
!
!Cc10h21=Dc10h21                         9.890E+07    1.00   13700.0 !
!                                rev / 9.890E+07    1.00   13700.0/
!
!Cc10h21=Ec10h21                         4.070E+08    1.05   18948.1 !
!                                rev / 4.070E+08    1.05   18948.1/
!
!Dc10h21=Ec10h21                         3.350E+09    1.00   38700 !
!                                rev / 3.350E+09    1.00   38700/

Ac10h21=Dc10h21                          5.130E+00    3.23   16849.0 !
Tsang 2008
                                 rev / 4.170E-01    3.57   18942.0 /
Ac10h21=Ec10h21                          1.490E+01    2.96   10792.0 !
                                 rev / 4.790E+00    3.14   12956.0 /

Bc10h21=Dc10h21                          2.951E+00    3.08   11017.0 !
                                 rev / 2.951E+00    3.08   11017.0 /
Bc10h21=Ec10h21                          1.400E-01    3.66   12982.0 !
                                 rev / 1.400E-01    3.66   12982.0 /

Cc10h21=Dc10h21                          1.862E+00    3.27   13199.0 !
                                 rev / 1.862E+00    3.27   13199.0 /
Cc10h21=Ec10h21                          1.412E+00    3.32   16146.0 !
                                 rev / 1.412E+00    3.32   16146.0 /


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) O2 addition
! cyC9h17+o2=cyC9h17O2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac10h21+o2=c10h21qjA                   9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!Bc10h21+o2=c10h21qjB                   1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!Cc10h21+o2=c10h21qjC                   1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Dc10h21+o2=c10h21qjD                   1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Ec10h21+o2=c10h21qjE                   1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 7) alkoxy formation
! cyC9h17+RO2=cyC9h17o+RO
! RO2= ho2, ch3o2, c2h5o2, nc3h7o2, ic3h7o2,
! ch3co3, hCO3, cyC9h17O2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21+ho2=c10h21ojA+oh               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+ho2=c10h21ojB+oh               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
```

```
Cc10h21+ho2=c10h21ojC+oh               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+ho2=c10h21ojD+oh               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+ho2=c10h21ojE+oh               7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+ch3o2=c10h21ojA+ch3o           7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+ch3o2=c10h21ojB+ch3o           7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+ch3o2=c10h21ojC+ch3o           7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+ch3o2=c10h21ojD+ch3o           7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+ch3o2=c10h21ojE+ch3o           7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+c2h5o2=c10h21ojA+c2h5o         7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+c2h5o2=c10h21ojB+c2h5o         7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+c2h5o2=c10h21ojC+c2h5o         7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+c2h5o2=c10h21ojD+c2h5o         7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+c2h5o2=c10h21ojE+c2h5o         7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+nc3h7o2=c10h21ojA+nc3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+nc3h7o2=c10h21ojB+nc3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+nc3h7o2=c10h21ojC+nc3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+nc3h7o2=c10h21ojD+nc3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+nc3h7o2=c10h21ojE+nc3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+ic3h7o2=c10h21ojA+ic3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+ic3h7o2=c10h21ojB+ic3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+ic3h7o2=c10h21ojC+ic3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+ic3h7o2=c10h21ojD+ic3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+ic3h7o2=c10h21ojE+ic3h7o       7.000E+12    0.00   -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjA=2c10h21ojA               7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjA=c10h21ojB+c10h21ojA      7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjA=c10h21ojC+c10h21ojA      7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjA=c10h21ojD+c10h21ojA      7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjA=c10h21ojE+c10h21ojA      7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB      7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
```

```
Bc10h21+c10h21qjB=2c10h21ojB              7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjB=c10h21ojC+c10h21ojB     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjB=c10h21ojD+c10h21ojB     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjB=c10h21ojE+c10h21ojB     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjC=c10h21ojB+c10h21ojC     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjC=2c10h21ojC              7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjC=c10h21ojD+c10h21ojC     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjC=c10h21ojE+c10h21ojC     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjD=c10h21ojB+c10h21ojD     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjD=2c10h21ojD              7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjD=c10h21ojE+c10h21ojD     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjE=c10h21ojB+c10h21ojE     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE     7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjE=2c10h21ojE              7.000E+12    0.00   -1000.0
! Curran 2002

!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h21oj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!***************************
! decomposition
! c10h21oj=aldehyde+alkyle
!***************************

!c10h21ojA=ch2o+Ac9h19                  1.000E+15    0.00   21600.0 !
!c10h21ojB=ch3hco+Ac8h17                7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c10h21ojB=ch3+c8h17hco                 7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c10h21ojC=ethco+Ac7h15                 7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c10h21ojC=c2h5+c7h15hco                7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c10h21ojD=nc3h7+c6h13hco               7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c10h21ojD=nc3h7hco+Ac6h13              7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c10h21ojE=pc4h9+c5h11hco               7.940E+14    0.00   15300.0 !
!c10h21ojE=nc4h9hco+Ac5h11              7.940E+14    0.00   15300.0 !

c10h21ojA=ch2o+Ac9h19                  2.100E+22   -2.57   12941.0 !
```

```
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-3457/RT)  Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojB=ch3hco+Ac8h17                 8.420E+09    1.21    9888.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojB=ch3+c8h17hco                  5.280E+09    1.24   13999.0 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-9043/RT)  Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojC=ethco+Ac7h15                  1.900E+10    1.15    9825.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojC=c2h5+c7h15hco                 3.890E+12    0.45    9071.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojD=nc3h7+c6h13hco                1.220E+12    0.63   10063.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojD=nc3h7hco+Ac6h13               5.670E+13    0.22   10812.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojE=pc4h9+c5h11hco                2.600E+14   -0.12   11248.5 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h21ojE=nc4h9hco+Ac5h11               8.890E+11    0.63   10405.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJCK vol. 38 pp. 250-275


!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h21q REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

c10h21qA=oh+c10h21ojA                   1.500E+16    0.00   42500.0 !
Curran
c10h21qB=oh+c10h21ojB                   1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c10h21qC=oh+c10h21ojC                   1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c10h21qD=oh+c10h21ojD                   1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran
c10h21qE=oh+c10h21ojE                   1.250E+16    0.00   41600.0 !
Curran

!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h21qj REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^

!***************************
! 1) isomerisation to QOOh
! 2) hydroperoxyalkyls ROOH formation
! 3) alkoxy RO formation
! 4) reaction with RO2
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOh
! c10h21qjX=c10h20rYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h21qjA=c10h20rBqA                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
```

```
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjA=c10h20rCqA                    5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjA=c10h20rDqA                    9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjA=c10h20rEqA                    1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjB=c10h20rAqB                    5.030E+09    1.00   35500.0 !
5-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjB=c10h20rCqB                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjB=c10h20rDqB                    5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjB=c10h20rEqB                    9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjB=c10h20rFqB                    1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjC=c10h20rAqC                    8.630E+08    1.00   28000.0 !
6-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjC=c10h20rBqC                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rDqC                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rEqC                    5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rFqC                    9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rGqC                    1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjD=c10h20rAqD                    1.480E+08    1.00   25000.0 !
7-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjD=c10h20rBqD                    5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rCqD                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rEqD                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rFqD                    5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rGqD                    9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rHqD                    1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjE=c10h20rAqE                    2.550E+07    1.00   24000.0 !
8-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjE=c10h20rBqE                    9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rCqE                    5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rDqE                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rFqE                    3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rGqE                    5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rHqE                    9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rIqE                    1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
!    ROOH formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h21qjA+ho2=c10h21qA+o2               2.900E+11    0.00    1550.0  !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjB+ho2=c10h21qB+o2               2.900E+11    0.00    1550.0  !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjC+ho2=c10h21qC+o2               2.900E+11    0.00    1550.0  !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjD+ho2=c10h21qD+o2               2.900E+11    0.00    1550.0  !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjE+ho2=c10h21qE+o2               2.900E+11    0.00    1550.0  !
idem ch3o2 Raventos-Duran

c10h21qjA+h2o2=c10h21qA+ho2             2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjB+h2o2=c10h21qB+ho2             2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjC+h2o2=c10h21qC+ho2             2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjD+h2o2=c10h21qD+ho2             2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjE+h2o2=c10h21qE+ho2             2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour

c10h21qjA+ho2=c10h21ojA+oh+o2           1.000E+11    0.00       0.0
c10h21qjB+ho2=c10h21ojB+oh+o2           1.000E+11    0.00       0.0
c10h21qjC+ho2=c10h21ojC+oh+o2           1.000E+11    0.00       0.0
c10h21qjD+ho2=c10h21ojD+oh+o2           1.000E+11    0.00       0.0
c10h21qjE+ho2=c10h21ojE+oh+o2           1.000E+11    0.00       0.0

c10h21qjA+ch3o2=c10h21ojA+ch3o+o2       1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjB+ch3o2=c10h21ojB+ch3o+o2       1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjC+ch3o2=c10h21ojC+ch3o+o2       1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjD+ch3o2=c10h21ojD+ch3o+o2       1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjE+ch3o2=c10h21ojE+ch3o+o2       1.400E+16   -1.61    1860.0 !
Westbrook 2009

c10h21qjA+c10h21qjA=c10h21ojA+c10h21ojA+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjB=c10h21ojB+c10h21ojB+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjC=c10h21ojC+c10h21ojB+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjD=c10h21ojD+c10h21ojB+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjE=c10h21ojE+c10h21ojB+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjC+c10h21qjC=c10h21ojC+c10h21ojC+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
```

```
c10h21qjC+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjC+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjD+c10h21qjD=c10h21ojD+c10h21ojD+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjD+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjE+c10h21qjE=c10h21ojE+c10h21ojE+o2       1.400E+16   -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009


!#####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h20rXqjY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!#####################

!***************************
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
!***************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation
! c10h20rYqX=c10h20rZqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h20rDqA=c8h16-1+c2h4o2h              2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rEqA=c7h14-1+c3h6ooh1-3           2.000E+13    0.00   28700.0 !

c10h20rEqB=c7h14-1+c3h6ooh2-1           2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rFqB=c6h12-1+c4h8rDqB             2.000E+13    0.00   28700.0 !

c10h20rFqC=c6h12-1+c4h8rAqB             2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rGqC=c5h10+c5h10rAqC              2.000E+13    0.00   28700.0 !

c10h20rAqD=c2h4+c8h16rAqB               2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rGqD=c5h10+c5h10rAqB              2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rHqD=c4h8+c6h12rAqC               2.000E+13    0.00   28700.0 !

c10h20rAqE=c2h4+c8h16rAqC               2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rBqE=c3h6+c7h14rAqB               2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rHqE=c4h8+c6h12rAqB               2.000E+13    0.00   28700.0 !
c10h20rIqE=c3h6+c7h14rAqC               2.000E+13    0.00   28700.0 !


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c9h18rYqX+o2=c9h18qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h20rBqA+o2=c10h20qjBqA               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rCqA+o2=c10h20qjCqA               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rDqA+o2=c10h20qjDqA               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rEqA+o2=c10h20qjEqA               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c10h20rAqB+o2=c10h20qjAqB               1.500E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
c10h20rCqB+o2=c10h20qjCqB               1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rDqB+o2=c10h20qjDqB               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rEqB+o2=c10h20qjEqB               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rFqB+o2=c10h20qjFqB               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c10h20rAqC+o2=c10h20qjAqC               9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c10h20rBqC+o2=c10h20qjBqC               9.500E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
c10h20rDqC+o2=c10h20qjDqC               1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rEqC+o2=c10h20qjEqC               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rFqC+o2=c10h20qjFqC               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rGqC+o2=c10h20qjGqC               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c10h20rAqD+o2=c10h20qjAqD               9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c10h20rBqD+o2=c10h20qjBqD               1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c10h20rCqD+o2=c10h20qjCqD               1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rEqD+o2=c10h20qjEqD               1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rFqD+o2=c10h20qjFqD               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rGqD+o2=c10h20qjGqD               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rHqD+o2=c10h20qjHqD               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c10h20rAqE+o2=c10h20qjAqE               9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c10h20rBqE+o2=c10h20qjBqE               1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c10h20rCqE+o2=c10h20qjCqE               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rDqE+o2=c10h20qjDqE               1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rFqE+o2=c10h20qjFqE               1.050E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rGqE+o2=c10h20qjGqE               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rHqE+o2=c10h20qjHqE               1.800E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rIqE+o2=c10h20qjIqE               1.700E+19   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c10h20rCqA=oh+ch2o+c9h18-1             5.000E+13    0.00   25500.0
!
!c10h20rDqB=oh+ch3hco+c8h16-1           5.000E+13    0.00   25500.0
!
!c10h20rAqC=oh+c7h15hco+c2h4            5.000E+13    0.00   25500.0
!
!c10h20rEqC=oh+ethco+c7h14-1            5.000E+13    0.00   25500.0
!
!c10h20rBqD=oh+c6h13hco+c3h6            5.000E+13    0.00   25500.0
!
!c10h20rFqD=oh+nc3h7hco+c6h12-1         5.000E+13    0.00   25500.0
!
!c10h20rCqE=oh+c5h11hco+c4h8            5.000E+13    0.00   25500.0
!
!c10h20rGqE=oh+nc4h9hco+c5h10           5.000E+13    0.00   25500.0
!

c10h20rCqA=oh+ch2o+c9h18-1             3.670E+12    0.545  28377.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rDqB=oh+ch3hco+c8h16-1           1.270E+18   -1.12   29189.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rAqC=oh+c7h15hco+c2h4            6.380E+15   -0.49   28717.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=1.3E+04.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rEqC=oh+ethco+c7h14-1            5.460E+17   -1.00   28585.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rBqD=oh+c6h13hco+c3h6            1.240E+15   -0.19   27943.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rFqD=oh+nc3h7hco+c6h12-1         1.300E+17   -0.81   28398.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rCqE=oh+c5h11hco+c4h8            8.470E+15   -0.44   28015.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rGqE=oh+nc4h9hco+c5h10           4.490E+16   -0.665  28240.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-
6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
!   (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c10h20rBqA=oh+c10h20o-AB              2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rCqA=oh+c10h20o-AC              2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rDqA=oh+c10h20o-AD              2.100E+08    0.00    6500.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rEqA=oh+c10h20o-AE              1.500E+08    0.00    1800.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c10h20rAqB=oh+c10h20o-AB              2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC              2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD              2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE              2.100E+08    0.00    6500.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF              1.500E+08    0.00    1800.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c10h20rAqC=oh+c10h20o-AC              2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rBqC=oh+c10h20o-BC              2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rDqC=oh+c10h20o-CD              2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rEqC=oh+c10h20o-CE              2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rFqC=oh+c10h20o-CF              2.100E+08    0.00    6500.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rGqC=oh+c10h20o-CG              1.500E+08    0.00    1800.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c10h20rAqD=oh+c10h20o-AD              2.100E+08    0.00    6500.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD              2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD              2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE              2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF              2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG              2.100E+08    0.00    6500.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rHqD=oh+c10h20o-CG              1.500E+08    0.00    1800.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

!c10h20rAqE=oh+c10h20o-AE              1.500E+08    0.00    1800.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE              2.100E+08    0.00    6500.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE              2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE              2.950E+11    0.00   22000.0
```

```
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rFqE=oh+c10h20o-EF               2.950E+11    0.00   22000.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rGqE=oh+c10h20o-DF               2.500E+10    0.00   15250.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rHqE=oh+c10h20o-CF               2.100E+08    0.00    6500.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rIqE=oh+c10h20o-BF               1.500E+08    0.00    1800.0
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8

c10h20rBqA=oh+c10h20o-AB               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rCqA=oh+c10h20o-AC               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rDqA=oh+c10h20o-AD               3.600E+09    0.00    7000.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c10h20rEqA=oh+c10h20o-AE               1.700E+08    0.00    1950.0  !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c10h20rAqB=oh+c10h20o-AB               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE               3.600E+09    0.00    7000.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF               1.700E+08    0.00    1950.0  !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c10h20rAqC=oh+c10h20o-AC               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rBqC=oh+c10h20o-BC               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rDqC=oh+c10h20o-CD               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rEqC=oh+c10h20o-CE               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rFqC=oh+c10h20o-CF               3.600E+09    0.00    7000.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c10h20rGqC=oh+c10h20o-CG               1.700E+08    0.00    1950.0  !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c10h20rAqD=oh+c10h20o-AD               3.600E+09    0.00    7000.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG               3.600E+09    0.00    7000.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c10h20rHqD=oh+c10h20o-CG               1.700E+08    0.00    1950.0  !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)

c10h20rAqE=oh+c10h20o-AE               1.700E+08    0.00    1950.0  !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE               3.600E+09    0.00    7000.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rFqE=oh+c10h20o-EF               2.950E+11    0.00   22000.0  !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c10h20rGqE=oh+c10h20o-DF               9.100E+10    0.00   16600.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c10h20rHqE=oh+c10h20o-CF               3.600E+09    0.00    7000.0  !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c10h20rIqE=oh+c10h20o-BF               1.700E+08    0.00    1950.0  !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
!    alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c10h20rAqB=ho2+c10h20-1                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1865 CR
!c10h20rBqA=ho2+c10h20-1                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1850 CR
!c10h20rBqC=ho2+c10h20-2                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1883 CR
!c10h20rCqB=ho2+c10h20-2                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1867 CR
!c10h20rCqD=ho2+c10h20-3                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1906 CR
!c10h20rDqC=ho2+c10h20-3                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1889 CR
!c10h20rDqE=ho2+c10h20-4                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1933 CR
!c10h20rEqD=ho2+c10h20-4                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1916 CR
!c10h20rFqE=ho2+c10h20-5                8.500E+12    0.00   26000.0
! DE 1947 CR

ho2+c10h20-1=c10h20rAqB                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-1=c10h20rBqA                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-2=c10h20rBqC                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-2=c10h20rCqB                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-3=c10h20rCqD                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-3=c10h20rDqC                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-4=c10h20rDqE                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-4=c10h20rEqD                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran
ho2+c10h20-5=c10h20rFqE                1.500E+11    0.00    7800.0 !
Curran


!######################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h20qjXqY REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!######################

!**************************
! ketohydroperoxides formation
!**************************

!c10h20qjBqA=oh+c10h19oAqB              3.350E+09    1.00   32500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c10h20qjCqA=oh+c10h19oAqC              5.750E+08    1.00   25000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c10h20qjDqA=oh+c10h19oAqD              9.890E+07    1.00   22000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol
!c10h20qjEqA=oh+c10h19oAqE              1.700E+07    1.00   21000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

!c10h20qjAqB=oh+c10h19oBqA              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjCqB=oh+c10h19oBqC              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjDqB=oh+c10h19oBqD              2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjEqB=oh+c10h19oBqE              4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjFqB=oh+c10h19oBqF              8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c10h20qjAqC=oh+c10h19oCqA              2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjBqC=oh+c10h19oCqB              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjDqC=oh+c10h19oCqD              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjEqC=oh+c10h19oCqE              2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjFqC=oh+c10h19oCqF              4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjGqC=oh+c10h19oCqG              8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

!c10h20qjAqD=oh+c10h19oDqA              4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjBqD=oh+c10h19oDqB              2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjCqD=oh+c10h19oDqC              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjEqD=oh+c10h19oDqE              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjFqD=oh+c10h19oDqF              2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjGqD=oh+c10h19oDqG              4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjHqD=oh+c10h19oDqH              8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjAqE=oh+c10h19oEqA              8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjBqE=oh+c10h19oEqB              4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjCqE=oh+c10h19oEqC              2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjDqE=oh+c10h19oEqD              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjFqE=oh+c10h19oEqF              1.675E+09    1.00   29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjGqE=oh+c10h19oEqG              2.875E+08    1.00   22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjHqE=oh+c10h19oEqH              4.945E+07    1.00   19000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol
!c10h20qjIqE=oh+c10h19oEqI              8.495E+06    1.00   18000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c10h20qjBqA=oh+c10h19oAqB              3.350E+09    1.00   33500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c10h20qjCqA=oh+c10h19oAqC              5.750E+08    1.00   26000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c10h20qjDqA=oh+c10h19oAqD              9.890E+07    1.00   23000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol
c10h20qjEqA=oh+c10h19oAqE              1.700E+07    1.00   22000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol

c10h20qjAqB=oh+c10h19oBqA              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjCqB=oh+c10h19oBqC              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjDqB=oh+c10h19oBqD              2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjEqB=oh+c10h19oBqE              4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjFqB=oh+c10h19oBqF              8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c10h20qjAqC=oh+c10h19oCqA              2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjBqC=oh+c10h19oCqB              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjDqC=oh+c10h19oCqD              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjEqC=oh+c10h19oCqE              2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjFqC=oh+c10h19oCqF              4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjGqC=oh+c10h19oCqG              8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

c10h20qjAqD=oh+c10h19oDqA              4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjBqD=oh+c10h19oDqB              2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjCqD=oh+c10h19oDqC              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjEqD=oh+c10h19oDqE              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjFqD=oh+c10h19oDqF              2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjGqD=oh+c10h19oDqG              4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjHqD=oh+c10h19oDqH              8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
```

```
c10h20qjAqE=oh+c10h19oEqA              8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjBqE=oh+c10h19oEqB              4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjCqE=oh+c10h19oEqC              2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjDqE=oh+c10h19oEqD              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjFqE=oh+c10h19oEqF              1.675E+09    1.00   30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjGqE=oh+c10h19oEqG              2.875E+08    1.00   23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjHqE=oh+c10h19oEqH              4.945E+07    1.00   20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol
c10h20qjIqE=oh+c10h19oEqI              8.495E+06    1.00   19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h19oq REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################


!***************************
! ketohydroperoxides DECOmPOSITION
!***************************

!c10h19oAqB=>oh+hco+c8h17hco            1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oAqC=>oh+ch2hco+c7h15hco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oAqD=>oh+ch2ch2hco+c6h13hco      1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oAqE=>oh+c3h6cho-1+c5h11hco      1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c10h19oBqA=>oh+ch2o+c8h17co            1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oBqC=>oh+ch3co+c7h15hco          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oBqD=>oh+ch2cooch3+c6h13hco      1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c5h11hco     1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oBqF=>oh+c3h6cooch3-1+nc4h9hco   1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c10h19oCqA=>oh+ch2o+nc7h15cooch2       1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oCqB=>oh+ch3hco+c7h15co          1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oCqD=>oh+c2h5co+c6h13hco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oCqE=>oh+c2h5cooch2+c5h11hco     1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oCqF=>oh+c2h5coc2h4p+nc4h9hco    1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+nc3h7hco   1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c10h19oDqA=>oh+ch2o+nc6h13coc2h4p      1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oDqB=>oh+ch3hco+nc6h13cooch2     1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oDqC=>oh+ethco+c6h13co           1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oDqE=>oh+c3h7co+c5h11hco         1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oDqF=>oh+nc4h9hco+nc3h7cooch2    1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oDqG=>oh+nc3h7hco+nc3h7coc2h4p   1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oDqH=>oh+ethco+nc3h7coc3h6-1     1.000E+16    0.00   44500.0 !

!c10h19oEqA=>oh+ch2o+nc5h11coc3h6-1     1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oEqB=>oh+ch3hco+nc5h11coc2h4p    1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oEqC=>oh+ethco+nc5h11cooch2      1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oEqD=>oh+nc3h7hco+c5h11co        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oEqF=>oh+nc4h9co+nc4h9hco        1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oEqG=>oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9    1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oEqH=>oh+ethco+nc4h9coc2h4p      1.000E+16    0.00   44500.0 !
!c10h19oEqI=>oh+ch3hco+nc4h9coc3h6-1    1.000E+16    0.00   44500.0 !

c10h19oAqB=>oh+hco+c8h17hco             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oAqC=>oh+ch2hco+c7h15hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oAqD=>oh+ch2ch2hco+c6h13hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oAqE=>oh+c3h6cho-1+c5h11hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !

c10h19oBqA=>oh+ch2o+c8h17co             1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oBqC=>oh+ch3co+c7h15hco           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oBqD=>oh+ch2cooch3+c6h13hco       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c5h11hco      1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oBqF=>oh+c3h6cooch3-1+nc4h9hco    1.500E+16    0.00   44500.0 !

c10h19oCqA=>oh+ch2o+nc7h15cooch2        1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oCqB=>oh+ch3hco+c7h15co           1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oCqD=>oh+c2h5co+c6h13hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oCqE=>oh+c2h5cooch2+c5h11hco      1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oCqF=>oh+c2h5coc2h4p+nc4h9hco     1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+nc3h7hco    1.500E+16    0.00   44500.0 !

c10h19oDqA=>oh+ch2o+nc6h13coc2h4p       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oDqB=>oh+ch3hco+nc6h13cooch2      1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oDqC=>oh+ethco+c6h13co            1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oDqE=>oh+c3h7co+c5h11hco          1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oDqF=>oh+nc4h9hco+nc3h7cooch2     1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oDqG=>oh+nc3h7hco+nc3h7coc2h4p    1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oDqH=>oh+ethco+nc3h7coc3h6-1      1.500E+16    0.00   44500.0 !

c10h19oEqA=>oh+ch2o+nc5h11coc3h6-1      1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oEqB=>oh+ch3hco+nc5h11coc2h4p     1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oEqC=>oh+ethco+nc5h11cooch2       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oEqD=>oh+nc3h7hco+c5h11co         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oEqF=>oh+nc4h9co+nc4h9hco         1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oEqG=>oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9     1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oEqH=>oh+ethco+nc4h9coc2h4p       1.500E+16    0.00   44500.0 !
c10h19oEqI=>oh+ch3hco+nc4h9coc3h6-1     1.500E+16    0.00   44500.0 !

!####################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h20o#x REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!####################

!*********************************
! O-ring decomposition
!*********************************

c10h20o-AB+h=>h2+acrol+Ac7h15           4.800E+08    1.50    2785.0 !
c10h20o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac7h15         2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac7h15       2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AB+h=>h2+ch2co+Ac8h17           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac8h17         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac8h17       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BC+h=>h2+mvk+Ac6h13             2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac6h13           1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac6h13         1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac7h15         2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac7h15       1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac7h15     1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+Ac5h11      2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+Ac5h11    1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+Ac5h11  1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc6h13        2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc6h13      1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc6h13    1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+pc4h9       2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+pc4h9     1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+pc4h9   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc5h11       2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc5h11     1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc5h11   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-EF+h=>h2+c2h3coc4h9+nc3h7       4.800E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-EF+oh=>h2o+c2h3coc4h9+nc3h7     2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc4h9+nc3h7   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AC+h=>h2+c9h18-1+hco            4.800E+08    1.50    2785.0 !
c10h20o-AC+oh=>h2o+c9h18-1+hco          2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c9h18-1+hco        2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AC+h=>h2+c2h4+c7h15co           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-AC+oh=>h2o+c2h4+c7h15co         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c7h15co       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BD+h=>h2+ch3co+c8h16-1          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BD+oh=>h2o+ch3co+c8h16-1        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c8h16-1      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BD+h=>h2+c3h6+c6h13co           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BD+oh=>h2o+c3h6+c6h13co         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c6h13co       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CE+h=>h2+c7h14-1+c2h5co         2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CE+oh=>h2o+c7h14-1+c2h5co       1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2h5co     1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CE+h=>h2+c4h8+c5h11co           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CE+oh=>h2o+c4h8+c5h11co         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c5h11co       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DF+h=>h2+c6h12-1+c3h7co         2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-DF+oh=>h2o+c6h12-1+c3h7co       1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c3h7co     1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DF+h=>h2+c5h10+nc4h9co          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-DF+oh=>h2o+c5h10+nc4h9co        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+nc4h9co      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AD+h=>h2+c2h4+nc6h13cooch2      4.800E+08    1.50    2785.0 !
c10h20o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc6h13cooch2    2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc6h13cooch2  2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AD+h=>h2+c8h16-1+ch2hco         2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-AD+oh=>h2o+c8h16-1+ch2hco       1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c8h16-1+ch2hco     1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c10h20o-BE+h=>h2+c7h14-1+ch2cooch3      2.400E+08    1.50    2005.0 !
!c10h20o-BE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2cooch3    1.200E+06    2.00   -1192.0 !
!c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2cooch3  1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c10h20o-BE+h=>h2+c3h6+nc5h11cooch2      2.400E+08    1.50    2005.0 !
!c10h20o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc5h11cooch2    1.200E+06    2.00   -1192.0 !
!c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc5h11cooch2  1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c10h20o-CF+h=>h2+c6h12-1+c2h5cooch2     2.400E+08    1.50    2005.0 !
!c10h20o-CF+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5cooch2   1.200E+06    2.00   -1192.0 !
!c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5cooch2 1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c10h20o-CF+h=>h2+c4h8+nc4h9cooch2       2.400E+08    1.50    2005.0 !
!c10h20o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc4h9cooch2     1.200E+06    2.00   -1192.0 !
!c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9cooch2   1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c10h20o-DG+h=>h2+c5h10+nc3h7cooch2      4.800E+08    1.50    2005.0 !
!c10h20o-DG+oh=>h2o+c5h10+nc3h7cooch2    2.400E+06    2.00   -1192.0 !
!c10h20o-DG+ho2=>h2o2+c5h10+nc3h7cooch2  4.000E+12    0.00   13260.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AE+h=>h2+c7h14-1+ch2ch2hco      4.800E+08    1.50    2785.0 !
c10h20o-AE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2ch2hco    2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2ch2hco 2.500E+04    2.50   11605.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AE+h=>h2+c2h4+nc5h11coc2h4p     2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc5h11coc2h4p   1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11coc2h4p 1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c10h20o-BF+h=>h2+c6h12-1+ch3coc2h4p     2.400E+08    1.50    2005.0 !
!c10h20o-BF+oh=>h2o+c6h12-1+ch3coc2h4p   1.200E+06    2.00   -1192.0 !
!c10h20o-BF+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch3coc2h4p 1.000E+04    2.50    9400.0
! Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BF+h=>h2+Fc10h19oB              2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BF+oh=>h2o+Fc10h19oB            1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BF+ho2=>h2o2+Fc10h19oB          1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BF+h=>h2+c3h6+nc4h9cooc2h4p     2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc4h9cooc2h4p   1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9cooc2h4p 1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!c10h20o-CG+h=>h2+c5h10+c2h5cooc2h4p     2.400E+08    1.50    2005.0 !
!c10h20o-CG+oh=>h2o+c5h10+c2h5cooc2h4p   1.200E+06    2.00   -1192.0 !
```

```
!c10h20o-CG+ho2=>h2o2+c5h10+c2h5coc2h4p 1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CG+h=>h2+Gc10h19oC             2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CG+oh=>h2o+Gc10h19oC           1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CG+ho2=>h2o2+Gc10h19oC         1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CG+h=>h2+c4h8+nc3h7coc2h4p     2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CG+oh=>h2o+c4h8+nc3h7coc2h4p   1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7coc2h4p 1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377


c10h20o-BE+h=h2+c5h11coc4h8-2          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BE+oh=h2o+c5h11coc4h8-2        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BE+ho2=h2o2+c5h11coc4h8-2      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BE+h=h2+ch3coc8h16-6           2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-BE+oh=h2o+ch3coc8h16-6         1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-BE+ho2=h2o2+ch3coc8h16-6       1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CF+h=h2+c2h5coc7h14-5          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CF+oh=h2o+c2h5coc7h14-5        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CF+ho2=h2o2+c2h5coc7h14-5      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CF+h=h2+c4h9coc5h10-3          2.400E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-CF+oh=h2o+c4h9coc5h10-3        1.200E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-CF+ho2=h2o2+c4h9coc5h10-3      1.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DG+h=h2+c3h7coc6h12-4         4.800E+08    1.50    2005.0 !
c10h20o-DG+oh=h2o+c3h7coc6h12-4       2.400E+06    2.00   -1192.0 !
c10h20o-DG+ho2=h2o2+c3h7coc6h12-4     2.000E+04    2.50    9400.0 !
Scott and Walker  2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c4h9coc5h10-3=c4h8+nc4h9coch2          2.000E+13    0.00    28700.0
c4h9coc5h10-3+o2=dec5*o8oo             1.800E+19   -2.50        0.0
dec5*o8oo=dec5*o6j8ooh                 5.750E+08    1.00    22000.0
dec5*o6j8ooh+o2=dec5*o6oo8ooh          1.200E+10    0.00    -2300.0
dec5*o6oo8ooh=oh+dec5*o8*o6ooh         2.875E+08    1.00    23000.0 !
E-2000
dec5*o8*o6ooh=oh+nc4h9co+c5ald3oxo     1.500E+16    0.00    44500.0

c2h5coc7h14-5=c6h12-1+c2h5coch2        2.000E+13    0.00    28700.0
c2h5coc7h14-5+o2=dec3*o6oo             1.800E+19   -2.50        0.0
dec3*o6oo=dec3*o4j6ooh                 5.750E+08    1.00    22000.0
dec3*o4j6ooh+o2=dec3*o4oo6ooh          1.200E+10    0.00    -2300.0
dec3*o4oo6ooh=>oh+dec3*o6*o4ooh         2.875E+08    1.00    23000.0
! E-2000
dec3*o6*o4ooh=oh+c2h5co+c7ald3oxo      1.500E+16    0.00    44500.0

ch3coc8h16-6=c7h14-1+ch2coch3          2.000E+13    0.00    28700.0
ch3coc8h16-6+o2=dec2*o5oo              1.800E+19   -2.50        0.0
dec2*o5oo=dec2*o3j5ooh                 5.750E+08    1.00    22000.0
dec2*o3j5ooh+o2=dec2*o3oo5ooh          1.200E+10    0.00    -2300.0
dec2*o3oo5ooh=oh+dec2*o5*o3ooh         2.875E+08    1.00    23000.0 !
E-2000
dec2*o5*o3ooh=oh+ch3co+c8ald3oxo       1.500E+16    0.00    44500.0

c5h11coc4h8-2=c3h6+nc5h11coch2         2.000E+13    0.00    28700.0
```

```
c5h11coc4h8-2+o2=dec5*o2oo             1.800E+19   -2.50        0.0
dec5*o2oo=dec5*o4j2ooh                 5.750E+08    1.00    22000.0
dec5*o4j2ooh+o2=dec5*o4oo2ooh          1.200E+10    0.00    -2300.0
dec5*o4oo2ooh=oh+dec2*o5*o4ooh         2.875E+08    1.00    23000.0 !
E-2000
dec2*o5*o4ooh=oh+c5h11co+c4ald3oxo     1.500E+16    0.00    44500.0

c3h7coc6h12-4=c5h10+nc3h7coch2         2.000E+13    0.00    28700.0
c3h7coc6h12-4+o2=dec4*o7oo             1.800E+19   -2.50        0.0
dec4*o7oo=dec4*o5j7ooh                 5.750E+08    1.00    22000.0
dec4*o5j7ooh+o2=dec4*o5oo7ooh          1.200E+10    0.00    -2300.0
dec4*o5oo7ooh=oh+dec4*o7*o5ooh         2.875E+08    1.00    23000.0 !
E-2000
dec4*o7*o5ooh=oh+c3h7co+c6ald3oxo      1.500E+16    0.00    44500.0

c4ald3oxo+o2=mecomeco+ho2                 2.000E+13   0.50  4.220E+04
!as nc3h7cho
c4ald3oxo+oh=mecomeco+h2o                 2.690e+10   0.76 -3.400e+02
!26  anc7: aldehydic
c4ald3oxo+h=mecomeco+h2                   4.000e+13   0.00  4.200e+03
!26  anc7; aldehydic
c4ald3oxo+o=mecomeco+oh                   5.000e+12   0.00  1.790e+03
!26  anc7; aldehydic
c4ald3oxo+ho2=mecomeco+h2o2               2.800e+12   0.00  1.360e+04
!26  anc7: aldehydic
c4ald3oxo+ch3o=mecomeco+ch3oh       1.150E+11   0.00  1280.0   !26
anc7: aldehydic
c4ald3oxo+ch3o2=mecomeco+ch3o2h           1.000E+12   0.00  9500.0
!26  anc7: aldehydic

c5ald3oxo+o2=etcomeco+ho2                 2.000E+13   0.50  4.220E+04
!as nc3h7cho
c5ald3oxo+oh=etcomeco+h2o                 2.690e+10   0.76 -3.400e+02
!26  anc7: aldehydic
c5ald3oxo+h=etcomeco+h2                   4.000e+13   0.00  4.200e+03
!26  anc7; aldehydic
c5ald3oxo+o=etcomeco+oh                   5.000e+12   0.00  1.790e+03
!26  anc7; aldehydic
c5ald3oxo+ho2=etcomeco+h2o2               2.800e+12   0.00  1.360e+04
!26  anc7: aldehydic
c5ald3oxo+ch3o=etcomeco+ch3oh       1.150E+11   0.00  1280.0   !26
anc7: aldehydic
c5ald3oxo+ch3o2=etcomeco+ch3o2h           1.000E+12   0.00  9500.0
!26  anc7: aldehydic

c6ald3oxo+o2=prcomeco+ho2                 2.000E+13   0.50  4.220E+04
!as nc3h7cho
c6ald3oxo+oh=prcomeco+h2o                 2.690e+10   0.76 -3.400e+02
!26  anc7: aldehydic
c6ald3oxo+h=prcomeco+h2                   4.000e+13   0.00  4.200e+03
!26  anc7; aldehydic
c6ald3oxo+o=prcomeco+oh                   5.000e+12   0.00  1.790e+03
!26  anc7; aldehydic
c6ald3oxo+ho2=prcomeco+h2o2               2.800e+12   0.00  1.360e+04
!26  anc7: aldehydic
c6ald3oxo+ch3o=prcomeco+ch3oh       1.150E+11   0.00  1280.0   !26
anc7: aldehydic
c6ald3oxo+ch3o2=prcomeco+ch3o2h           1.000E+12   0.00  9500.0
!26  anc7: aldehydic

c7ald3oxo+o2=bucomeco+ho2     2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7cho
c7ald3oxo+oh=bucomeco+h2o     2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
```

```
c7ald3oxo+h=bucomeco+h2       4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
c7ald3oxo+o=bucomeco+oh       5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
c7ald3oxo+ho2=bucomeco+h2o2   2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
c7ald3oxo+ch3o=bucomeco+ch3oh       1.150E+11   0.00  1280.0   !26
anc7: aldehydic
c7ald3oxo+ch3o2=bucomeco+ch3o2h           1.000E+12   0.00  9500.0
!26  anc7: aldehydic

c8ald3oxo+o2=c5h11coch2co+ho2             2.000E+13   0.50  4.220E+04
!as nc3h7cho
c8ald3oxo+oh=c5h11coch2co+h2o             2.690e+10   0.76 -3.400e+02
!26  anc7: aldehydic
c8ald3oxo+h=c5h11coch2co+h2                     4.000e+13   0.00
4.200e+03   !26  anc7; aldehydic
c8ald3oxo+o=c5h11coch2co+oh                     5.000e+12   0.00
1.790e+03   !26  anc7; aldehydic
c8ald3oxo+ho2=c5h11coch2co+h2o2                 2.800e+12   0.00
1.360e+04   !26  anc7: aldehydic
c8ald3oxo+ch3o=c5h11coch2co+ch3oh         1.150E+11   0.00  1280.0
!26  anc7: aldehydic
c8ald3oxo+ch3o2=c5h11coch2co+ch3o2h       1.000E+12   0.00  9500.0
!26  anc7: aldehydic

mecomeco=>ch2coch3+co                     1.834e+15  -0.73  1.291e+04
!Glaude et al., DMC c2h5co
etcomeco=>c2h5coch2+co                    1.834e+15  -0.73  1.291e+04
!Glaude et al., DMC c2h5co
prcomeco=>nc3h7coch2+co                 1.834e+15  -0.73  1.291e+04
!Glaude et al., DMC c2h5co
bucomeco=>nc4h9coch2+co                   1.834e+15  -0.73  1.291e+04
!Glaude et al., DMC c2h5co
c5h11coch2co=co+nc5h11coch2         1.834E+15  -0.73  12910.0 !
Glaude et al., DMC c2h5co


!######################
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
! yc10h19ox REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^^
!######################

ch3coc2h4p+c6h12-1=Fc10h19oB           1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3co sur c de c=o
                                                                      !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                      !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
nc3h7+ch3coc5h9-1=Fc10h19oB            1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3co sur c de c=o
                                                                      !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                      !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)

c2h5coc2h4p+c5h10=Gc10h19oC           1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3co sur c de c=o
                                                                      !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                      !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
c2h5+c2h5coc5h9-1=Gc10h19oC            1.320E+04    2.48    6130.0 !
```

```
addition de ch3co sur c de c=o
                                                                      !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                      !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h20 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

!*********************************
! 1) addition of ho2
! 2) addition of Oh
! 3) addition of O
! 4) addition of ho2
! 5) decomposition by R
!*********************************

c10h20-1=ac3h5+Ac7h15                  2.500E+16   0.00  70000.0 !
Yayhaoui
c10h20-1=Dc4h7-1+Ac6h13                1.000E+16   0.00  71000.0
c10h20-1=Ec5h9-1+Ac5h11                1.000E+16   0.00  71000.0
c10h20-1=Fc6h11-1+pc4h9                1.000E+16   0.00  71000.0

Cc10h19-1+h=c10h20-1                  1.000E+13    0.00       0.0 !
Dc10h19-2+h=c10h20-2                  1.000E+13    0.00       0.0 !
Ec10h19-3+h=c10h20-3                  1.000E+13    0.00       0.0 !
Fc10h19-4+h=c10h20-4                  1.000E+13    0.00       0.0 !


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) addition of ho2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h20-1+ho2=>oh+ch2o+c9h18-1          2.500E+12    1.00   25000.0 !
c10h20-2+ho2=>oh+ch3hco+c8h16-1        2.500E+12    1.00   25000.0 !
c10h20-2+ho2=>oh+c2h4+c7h15hco         2.500E+12    1.00   25000.0 !
c10h20-3+ho2=>oh+ethco+c7h14-1         2.500E+12    1.00   25000.0 !
c10h20-3+ho2=>oh+c3h6+c6h13hco         2.500E+12    1.00   25000.0 !
c10h20-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c6h12-1      2.500E+12    1.00   25000.0 !
c10h20-4+ho2=>oh+c4h8+c5h11hco         2.500E+12    1.00   25000.0 !
c10h20-5+ho2=>oh+c5h10+nc4h9hco        5.000E+12    1.00   25000.0 !
! *2

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition of Oh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!


c10h20-1+oh=ch2o+Ac9h19                1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-1+oh=ch3+c8h17hco               1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-2+oh=ch3hco+Ac8h17              1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-2+oh=c2h5+c7h15hco              1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-3+oh=ethco+Ac7h15               1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-3+oh=nc3h7+c6h13hco             1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-4+oh=nc3h7hco+Ac6h13            1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-4+oh=pc4h9+c5h11hco             1.400E+12    0.00    -900.0  !
c10h20-5+oh=Ac5h11+nc4h9hco            2.800E+12    0.00    -900.0  !
*2

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) addition of O
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!


c10h20-1+o=ch2o+c9h18-1                 3.400E+07    1.83     550.0  !
c10h20-2+o=ch3hco+c8h16-1               3.400E+07    1.83     550.0  !
c10h20-2+o=c2h4+c7h15hco                3.400E+07    1.83     550.0  !
c10h20-3+o=ethco+c7h14-1                3.400E+07    1.83     550.0  !
c10h20-3+o=c3h6+c6h13hco                3.400E+07    1.83     550.0  !
c10h20-4+o=nc3h7hco+c6h12-1             3.400E+07    1.83     550.0  !
c10h20-4+o=c4h8+c5h11hco                3.400E+07    1.83     550.0  !
c10h20-5+o=c5h10+nc4h9hco               6.800E+07    1.83     550.0  !
*2

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) addition of ho2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h20-1+ho2=oh+c10h20o-AB              1.000E+12    0.00   14400.0  !
c10h20-2+ho2=oh+c10h20o-BC              1.000E+12    0.00   14400.0  !
c10h20-3+ho2=oh+c10h20o-CD              1.000E+12    0.00   14400.0  !
c10h20-4+ho2=oh+c10h20o-DE              1.000E+12    0.00   14400.0  !
c10h20-5+ho2=oh+c10h20o-EF              1.000E+12    0.00   14400.0  !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) metathesis
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h20-1+h=h2+Cc10h19-1                 1.700E+05    2.50    2490.0  !
c10h20-1+oh=h2o+Cc10h19-1               3.100E+06    2.00    -300.0  !
!c10h20-1+ho2=h2o2+Cc10h19-1             9.600E+03    2.60   13900.0
!
c10h20-1+ho2=h2o2+Cc10h19-1             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-1+ch3=ch4+Cc10h19-1              2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-1+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1         2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-1+c2h5=c2h6+Cc10h19-1            2.200E+00    3.50    6835.0  !
c10h20-1+o=oh+Cc10h19-1                 6.000E+10    0.70    7682.0  !

c10h20-2+h=h2+Cc10h19-1                 1.700E+05    2.50    2490.0  !
c10h20-2+oh=h2o+Cc10h19-1               3.100E+06    2.00    -300.0  !
!c10h20-2+ho2=h2o2+Cc10h19-1             9.600E+03    2.60   13900.0
!
c10h20-2+ho2=h2o2+Cc10h19-1             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-2+ch3=ch4+Cc10h19-1              2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1         2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-2+c2h5=c2h6+Cc10h19-1            2.200E+00    3.50    6835.0  !
c10h20-2+o=oh+Cc10h19-1                 6.000E+10    0.70    7682.0  !

c10h20-2+h=h2+Dc10h19-2                 1.700E+05    2.50    2490.0  !
c10h20-2+oh=h2o+Dc10h19-2               3.100E+06    2.00    -300.0  !
!c10h20-2+ho2=h2o2+Dc10h19-2             9.600E+03    2.60   13900.0
!
c10h20-2+ho2=h2o2+Dc10h19-2             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-2+ch3=ch4+Dc10h19-2              2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2         2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-2+c2h5=c2h6+Dc10h19-2            2.200E+00    3.50    6835.0  !
c10h20-2+o=oh+Dc10h19-2                 6.000E+10    0.70    7682.0  !

c10h20-3+h=h2+Dc10h19-2                 1.700E+05    2.50    2490.0  !
c10h20-3+oh=h2o+Dc10h19-2               3.100E+06    2.00    -300.0  !
!c10h20-3+ho2=h2o2+Dc10h19-2             9.600E+03    2.60   13900.0
!
```

```
c10h20-3+ho2=h2o2+Dc10h19-2             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-3+ch3=ch4+Dc10h19-2              2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2         2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-3+c2h5=c2h6+Dc10h19-2            2.200E+00    3.50    6835.0  !
c10h20-3+o=oh+Dc10h19-2                6.000E+10    0.70    7682.0  !

c10h20-3+h=h2+Ec10h19-3                 1.700E+05    2.50    2490.0  !
c10h20-3+oh=h2o+Ec10h19-3               3.100E+06    2.00    -300.0  !
!c10h20-3+ho2=h2o2+Ec10h19-3             9.600E+03    2.60   13900.0
!
c10h20-3+ho2=h2o2+Ec10h19-3             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-3+ch3=ch4+Ec10h19-3              2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3         2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-3+c2h5=c2h6+Ec10h19-3            2.200E+00    3.50    6835.0  !
c10h20-3+o=oh+Ec10h19-3                 6.000E+10    0.70    7682.0  !

c10h20-4+h=h2+Ec10h19-3                 1.700E+05    2.50    2490.0  !
c10h20-4+oh=h2o+Ec10h19-3               3.100E+06    2.00    -300.0  !
!c10h20-4+ho2=h2o2+Ec10h19-3             9.600E+03    2.60   13900.0
!
c10h20-4+ho2=h2o2+Ec10h19-3             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-4+ch3=ch4+Ec10h19-3              2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3         2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-4+c2h5=c2h6+Ec10h19-3            2.200E+00    3.50    6835.0  !
c10h20-4+o=oh+Ec10h19-3                 6.000E+10    0.70    7682.0  !

c10h20-4+h=h2+Fc10h19-4                 1.700E+05    2.50    2490.0  !
c10h20-4+oh=h2o+Fc10h19-4               3.100E+06    2.00    -300.0  !
!c10h20-4+ho2=h2o2+Fc10h19-4             9.600E+03    2.60   13900.0
!
c10h20-4+ho2=h2o2+Fc10h19-4             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-4+ch3=ch4+Fc10h19-4              2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4         2.200E+00    3.50    5675.0  !
c10h20-4+c2h5=c2h6+Fc10h19-4            2.200E+00    3.50    6835.0  !
c10h20-4+o=oh+Fc10h19-4                 6.000E+10    0.70    7682.0  !

c10h20-5+h=h2+Fc10h19-4                 3.400E+05    2.50    2490.0  !
*2
c10h20-5+oh=h2o+Fc10h19-4               6.200E+06    2.00    -300.0  !
*2
!c10h20-5+ho2=h2o2+Fc10h19-4             1.920E+04    2.60   13900.0
! *2
c10h20-5+ho2=h2o2+Fc10h19-4             6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott and Walker 2002
c10h20-5+ch3=ch4+Fc10h19-4              4.400E+00    3.50    5675.0  !
*2
c10h20-5+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4         4.400E+00    3.50    5675.0  !
*2
c10h20-5+c2h5=c2h6+Fc10h19-4            4.400E+00    3.50    6835.0  !
*2
c10h20-5+o=oh+Fc10h19-4                 1.200E+11    0.70    7682.0  !
*2


!c10h20-1+oh=c10h20rohAB                 9.500E+12    0.00    -782.0 !
!c10h20rohAB+o2=c10h20qjohAB             4.000E+12    0.00       0.0 !
!c10h20qjohAB=>oh+ch2o+c8h17hco          1.000E+16    0.00   25000.0 !

!c10h20-2+oh=c10h20rohBC                 9.500E+12    0.00    -782.0 !
!c10h20rohBC+o2=c10h20qjohBC             4.000E+12    0.00       0.0 !
```

```
!c10h20qjohBC=>oh+ch3hco+c7h15hco        1.000E+16    0.00   25000.0 !

!c10h20-3+oh=c10h20rohCD                 9.500E+12    0.00    -782.0 !
!c10h20rohCD+o2=c10h20qjohCD             2.000E+12    0.00       0.0 !
!c10h20qjohCD=>oh+ethco+c6h13hco         1.000E+16    0.00   25000.0 !

!c10h20-4+oh=c10h20rohDE                 9.500E+12    0.00    -782.0 !
!c10h20rohDE+o2=c10h20qjohDE             4.000E+12    0.00       0.0 !
!c10h20qjohDE=>oh+nc3h7hco+c5h11hco      1.000E+16    0.00   25000.0 !

!c10h20-5+oh=c10h20rohEF                 9.500E+12    0.00    -782.0 !
!c10h20rohEF+o2=c10h20qjohEF             2.000E+12    0.00       0.0 !
!c10h20qjohEF=>oh+nc4h9hco+nc4h9hco      1.000E+16    0.00   25000.0 !

c10h20-1+oh=c10h20rohAB                 2.760E+12    0.00   -1042.0 !
c10h20rohAB+o2=c10h20qjohAB             1.000E+12    0.00   -1100.0 !
c10h20qjohAB=>oh+ch2o+c8h17hco          1.000E+12    0.00   28680.0 !

c10h20-2+oh=c10h20rohBC                 2.760E+12    0.00   -1042.0 !
c10h20rohBC+o2=c10h20qjohBC             1.000E+12    0.00   -1100.0 !
c10h20qjohBC=>oh+ch3hco+c7h15hco        1.000E+12    0.00   28680.0 !

c10h20-3+oh=c10h20rohCD                 2.760E+12    0.00   -1042.0 !
c10h20rohCD+o2=c10h20qjohCD             1.000E+12    0.00   -1100.0 !
c10h20qjohCD=>oh+ethco+c6h13hco         1.000E+12    0.00   28680.0 !

c10h20-4+oh=c10h20rohDE                 2.760E+12    0.00   -1042.0 !
c10h20rohDE+o2=c10h20qjohDE             1.000E+12    0.00   -1100.0 !
c10h20qjohDE=>oh+nc3h7hco+c5h11hco      1.000E+12    0.00   28680.0 !

c10h20-5+oh=c10h20rohEF                 2.760E+12    0.00   -1042.0 !
c10h20rohEF+o2=c10h20qjohEF             1.000E+12    0.00   -1100.0 !
c10h20qjohEF=>oh+nc4h9hco+nc4h9hco      1.000E+12    0.00   28680.0 !


!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h19 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

!**************
! decomposition
!**************


!Cc10h19-1=c4h6+Ac6h13                   2.500E+13    0.00   35000.0 !
mati
Cc10h19-1=c4h6+Ac6h13                   1.339E+15   -0.52   38320.0 !
Curran
Dc10h19-2=c5h8-13+Ac5h11                2.500E+13    0.00   35000.0 !
idem Cc10h19-1
Ec10h19-3=c6h10-13+pc4h9                2.500E+13    0.00   35000.0 !
idem Cc10h19-1
Fc10h19-4=c7h12-13+nc3h7                2.500E+13    0.00   35000.0 !
idem Cc10h19-1

!################
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! c10h18 REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################


!################
```

```
!^^^^^^^^^^^^^^^^
! decanal REACTIONS
!^^^^^^^^^^^^^^^^
!################

c9h19hco+h=h2+c9h19co                   4.000E+13    0.00    4200.0  !
ALD 5367
c9h19hco+oh=h2o+c9h19co                 4.200E+12    0.00     500.0  !
ALD 5368
c9h19hco+ho2=h2o2+c9h19co               1.000E+12    0.00   10000.0  !
ALD 5369
c9h19hco+ch3=ch4+c9h19co                2.000E-06    5.60    2500.0  !
ALD 5370
c9h19hco+c2h5=c2h6+c9h19co              1.300E+12    0.00    8500.0  !
ALD 5371

c9h19hco+o2=ho2+c9h19co                 1.005E+13     0.00  40700.0 !
Curran

c9h19co+M=co+Ac9h19+M                   8.640E+15    0.00   14400.0 !
c9h19co+ho2=>co2+oh+Ac9h19              2.000E+13    0.00       0.0


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€                Dégradation des espèces issues du sous-mécanisme du
décane                   €
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!COmPOSES DICARNONYLES
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€



!*********************************
! choch2ch2cho
!*********************************

choch2ch2cho+oh=h2o+choch2ch2co         5.380E+10    0.76    -340.0 !
idem c2h5cho+oh=c2h5co+h2o *2    Curran
choch2ch2cho+h=h2+choch2ch2co           8.000E+13    0.00    4200.0 !
idem c2h5cho+h=c2h5co+h2   *2    Curran
choch2ch2cho+o=oh+choch2ch2co           1.000E+13    0.00    1790.0 !
idem c2h5cho+o=c2h5co+oh   *2    Curran
choch2ch2cho+ch3=ch4+choch2ch2co        3.400E+12    0.00    8440.0 !
idem nc3h7cho+ch3=nc3h7co+ch4 *2 Curran
choch2ch2cho+ho2=h2o2+choch2ch2co       5.600E+12    0.00   13600.0 !
idem c2h5cho+ho2=c2h5co+h2o2  *2 Curran
choch2ch2cho+o2=ho2+choch2ch2co         4.000E+13    0.50   42200.0 !
idem nc3h7cho+o2=nc3h7co+ho2  *2 Curran

choch2ch2co+M=co+ch2ch2hco+M            8.640E+15    0.00   14400.0 !
choch2ch2co+ho2=oh+co2+ch2ch2hco        2.000E+13    0.00       0.0

!RADICAUX KETONYL


!*********************************
! nc7h15coch2
```

```
!*********************************

nc7h15coch2=Ac7h15+ch2co                    1.000E+13    0.00
28000.0 ! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
nc7h15coch2+o2=nc7h15coch2o2            9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc7h15coch2o2+ho2=c9h17oBqA+o2              2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
!nc7h15coch2o2+ho2=nc7h15coch2o2h+o2          2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
!nc7h15coch2o2h=nc7h15coch2o+oh               1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
!ch2o+c7h15co=nc7h15coch2o                  1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

!*********************************
! nc6h13coch2
!*********************************

nc6h13coch2=Ac6h13+ch2co                    1.000E+13    0.00
28000.0 ! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
nc6h13coch2+o2=nc6h13coch2o2            9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc6h13coch2o2+ho2=nc6h13coch2o2h+o2     2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
nc6h13coch2o2h=nc6h13coch2o+oh                1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
ch2o+c6h13co=nc6h13coch2o                   1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

!*********************************
! nc5h11coch2
!*********************************

nc5h11coch2=Ac5h11+ch2co                    1.000E+13    0.00
28000.0 ! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
nc5h11coch2+o2=nc5h11coch2o2            9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc5h11coch2o2+ho2=c7h13oBqA+o2          2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc5h11coch2o2+ho2=nc5h11coch2o2h+o2          2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
!nc5h11coch2o2h=nc5h11coch2o+oh               1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
!ch2o+c5h11co=nc5h11coch2o                  1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

!*********************************
! nc4h9coch2
!*********************************

nc4h9coch2=pc4h9+ch2co                    1.000E+13    0.00   28000.0
! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
nc4h9coch2+o2=nc4h9coch2o2                9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc4h9coch2o2+ho2=c6h11oBqA+o2         2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc4h9coch2o2+ho2=nc4h9coch2o2h+o2     2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc4h9coch2o2h=nc4h9coch2o+oh          1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
!ch2o+nc4h9co=nc4h9coch2o                   1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te
```

```
!*********************************
! c2h5coc3h6-1
!*********************************

c2h5coc3h6-1=c2h5coch2+c2h4             2.000E+13    0.00   27000.0 !
c2h5coc3h6-1+o2=c2h5coc3h6o2-1                9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c2h5coc3h6o2-1+ho2=c6h11oCqF+o2         2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!c2h5coc3h6o2-1+ho2=c2h5coc3h6o2h-1+o2  2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!c2h5coc3h6o2h-1=c2h5coc3h6o-1+oh       1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
!ch2o+c2h5coc2h4p=c2h5coc3h6o-1               1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

!*********************************
! nc3h7coc2h4p
!*********************************


!nc3h7coc2h4p=c3h7co+c2h4                5.398E+17   -1.45   26040.0 !
!                                 rev / 2.500E+11    0.00    7800.0 /
nc3h7coc2h4p=c3h7co+c2h4                1.550E+17   -1.46   27840.0 !
nc3h7coc2h4p+o2=nc3h7coc2h4o2           9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc3h7coc2h4o2+ho2=c6h11oCqA+o2              2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
!nc3h7coc2h4o2+ho2=nc3h7coc2h4o2h+o2          2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
!nc3h7coc2h4o2h=nc3h7coc2h4o+oh               1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
!ch2o+nc3h7coch2=nc3h7coc2h4o           1.500E+11    0.00   11900.0 !
18  anc7, alk to te


!*********************************
! nc4h9coc2h4p
!*********************************

!nc4h9co+c2h4=nc4h9coc2h4p               2.500E+11    0.00    7800.0 !
!nc4h9co+c2h4=nc4h9coc2h4p               7.000E+10    0.00    9600.0 !
nc4h9coc2h4p=nc4h9co+c2h4               1.550E+17   -1.46   27840.0 !
nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2           9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc4h9coc2h4o2+ho2=c7h13oCqA+o2          2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc4h9coc2h4o2+ho2=nc4h9coc2h4o2h+o2          2.290E+11    0.00   -
1790.0 ! Atkinson et al., 2001
!nc4h9coc2h4o2h=nc4h9coc2h4o+oh               1.500E+16    0.00
42500.0 ! 17  anc7, primary s
!ch2o+nc4h9coch2=nc4h9coc2h4o           1.500E+11    0.00   11900.0 !
18  anc7, alk to te

!*********************************
! nc5h11coc2h4
!*********************************

nc5h11coc2h4p=c5h11co+c2h4              1.550E+17   -1.46   27840.0 !
nc5h11coc2h4p+o2=nc5h11coc2h4o2                 9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc5h11coc2h4o2+ho2=nc5h11coc2h4o2h+o2   2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
```

```
nc5h11coc2h4o2h=nc5h11coc2h4o+oh        1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
ch2o+nc5h11coch2=nc5h11coc2h4o                1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te

!*********************************
! nc6h13coc2h4p
!*********************************

!c6h13co+c2h4=nc6h13coc2h4p              2.500E+11    0.00    7800.0 !
!c6h13co+c2h4=nc6h13coc2h4p              7.000E+10    0.00    9600.0 !
nc6h13coc2h4p=c6h13co+c2h4              1.550E+17   -1.46   27840.0 !
nc6h13coc2h4p+o2=nc6h13coc2h4o2                 9.000E+18   -2.50
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc6h13coc2h4o2+ho2=c9h17oCqA+o2         2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc6h13coc2h4o2+ho2=nc6h13coc2h4o2h+o2  2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc6h13coc2h4o2h=nc6h13coc2h4o+oh       1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
!ch2o+nc6h13coch2=nc6h13coc2h4o               1.500E+11    0.00
11900.0 ! 18  anc7, alk to te


!*********************************
! nc3h7coc3h6-1
!*********************************

nc3h7coc3h6-1=nc3h7coch2+c2h4           2.000E+13    0.00   27000.0 !
nc3h7coc3h6-1+o2=nc3h7coc3h6o2-1        9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc3h7coc3h6o2-1+ho2=c7h13oDqA+o2        2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc3h7coc3h6o2-1+ho2=nc3h7coc3h6o2h-1+o2  2.290E+11    0.00   -1790.0
! Atkinson et al., 2001
!nc3h7coc3h6o2h-1=nc3h7coc3h6o-1+oh     1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
!ch2o+nc3h7coc2h4p=nc3h7coc3h6o-1       1.500E+11    0.00   11900.0 !
18  anc7, alk to te

!*********************************
! c4h9coc3h6-1
!*********************************

c2h4+nc4h9coch2=nc4h9coc3h6-1           1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de Rc(=o)ch2 sur c de c=c
                                                                       !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                       !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
nc4h9coc3h6-1+o2=nc4h9coc3h6o2-1        9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc4h9coc3h6o2-1+ho2=nc4h9coc3h6o2h-1+o2  2.290E+11    0.00   -1790.0
! Atkinson et al., 2001
nc4h9coc3h6o2h-1=nc4h9coc3h6o-1+oh      1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
ch2o+nc4h9coc2h4p=nc4h9coc3h6o-1        1.500E+11    0.00   11900.0 !
18  anc7, alk to te

!*********************************
! nc5h11coc3h6-1
!*********************************

c2h4+nc5h11coch2=nc5h11coc3h6-1         1.320E+04    2.48    6130.0 !
```

```
addition de Rc(=o)ch2 sur c de c=c
                                                                       !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                       !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
!nc5h11coc3h6-1=nc5h11coch2+c2h4        2.000E+13    0.00   27000.0 !
nc5h11coc3h6-1+o2=nc5h11coc3h6o2-1      9.000E+18   -2.50       0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
nc5h11coc3h6o2-1+ho2=c9h17oDqA+o2       2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!nc5h11coc3h6o2-1+ho2=npecoc3h6o2h-1+o2 2.290E+11    0.00   -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
!npecoc3h6o2h-1=nc5h11coc3h6o-1+oh      1.500E+16    0.00   42500.0 !
17  anc7, primary s
!ch2o+nc5h11coc2h4p=nc5h11coc3h6o-1     1.500E+11    0.00   11900.0 !
18  anc7, alk to te

!*********************************
! ch3coc5h9-1
!*********************************

ch3coc5h9-1+oh=ch2coc5h9-1+h2o          5.100E+11    0.00    1192.0 !
ch3coc5h9-1+ho2=ch2coc5h9-1+h2o2        2.380E+04    2.55   14690.0 !
ch3coc5h9-1+h=ch2coc5h9-1+h2            9.300E+12    0.00    6357.0 !

ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-15+h2o         8.450E+11    0.00    -228.0 !
ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-15+h2o2       2.000E+11    0.00    8698.0 !
ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-15+h2           4.460E+06    2.00    3200.0 !

ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-13+h2o         4.186E+06    2.00    -543.0 !
idem c4h8
ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-13+h2o2       1.000E+11    0.00   17060.0 !
Yahyaoui
ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-13+h2           6.550E+12    0.00    4445.0 !
Yahyaoui

!ch2coc5h9-1=ch2co+Ec5h9-1               1.570E+13    0.00   30000.0
ch2co+Ec5h9-1=ch2coc5h9-1               3.330E+10    0.00    6397.0 !
Addition of ch3 to c of c=o
                                                                       !
Analogy with ch3cho + c2h5 = sc4h9o, Table XII
                                                                       !
h.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
!ch3coc5h8-15=mvk+ac3h5                 2.500E+13    0.00   45000.0
mvk+ac3h5=ch3coc5h8-15                  8.800E+03    2.48    6130.0 !
prim allyl rad add to ext c=c
!c4h6+ch2coch3=ch3coc5h8-13             2.130E+02    2.91    9290.0 !
c4h6+ch2coch3=ch3coc5h8-13              1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3 sur c de c=c
                                                                       !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                       !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)

!*********************************
! c2h5coc5h9-1
!*********************************

c2h5coc5h9-1+oh=sc2h4coc5h9-1+h2o       8.450E+11    0.00    -228.0 !
c2h5coc5h9-1+ho2=sc2h4coc5h9-1+h2o2     2.000E+11    0.00    8698.0 !
c2h5coc5h9-1+h=sc2h4coc5h9-1+h2         4.460E+06    2.00    3200.0 !

c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-15+h2o       8.450E+11    0.00    -228.0 !
c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-15+h2o2     2.000E+11    0.00    8698.0 !
```

```
c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-15+h2         4.460E+06    2.00    3200.0 !

c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-13+h2o       4.186E+06    2.00    -543.0 !
idem c4h8
c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-13+h2o2     1.000E+11    0.00   17060.0 !
Yahyaoui
c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-13+h2         6.550E+12    0.00    4445.0 !
Yahyaoui

ch3chco+Ec5h9-1=sc2h4coc5h9-1           3.330E+10    0.00    6397.0 !
Addition of ch3 to c of c=o
                                                                    !
Analogy with ch3cho + c2h5 = sc4h9o, Table XII
                                                                    !
h.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
c2h5coc2h3+ac3h5=c2h5coc5h8-15          8.800E+03    2.48    6130.0 !
prim allyl rad add to ext c=c
c4h6+c2h5coch2=c2h5coc5h8-13            1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3 sur c de c=c
                                                                    !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                    !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
!

!*********************************
! c2h3coc3h7
!*********************************

c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-3+h2o          8.450E+11    0.00    -228.0 !
c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-3+h2o2        2.000E+11    0.00    8698.0 !
c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-3+h2            4.460E+06    2.00    3200.0 !

c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-2+h2o          3.165E+07    1.64    -247.0 !
c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-2+h2o2        5.600E+12    0.00   17700.0 !
c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-2+h2            1.300E+06    2.40    4471.0 !

divinket+ch3=c2h3coc3h6-3               1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3 sur c de c=c
                                                                    !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                    !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
c3h6+c2h3co=c2h3coc3h6-2                1.000E+11    0.00    7800.0 !
Addition of c=o rad to c of c=c
                                                                    !
Analogy with c3h6+ch3co=c3h6coch3-2 from Curran
!
!*********************************
! c2h3coc4h9
!*********************************

c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-4+h2o          8.450E+11    0.00    -228.0 !
c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-4+h2o2        2.000E+11    0.00    8698.0 !
c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-4+h2            4.460E+06    2.00    3200.0 !

c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-3+h2o          3.165E+07    1.64    -247.0 !
c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-3+h2o2        5.600E+12    0.00   17700.0 !
c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-3+h2            1.300E+06    2.40    4471.0 !

divinket+c2h5=c2h3coc4h8-4              1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3 sur c de c=c
                                                                    !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
```

```
                                                                    !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
c4h8+c2h3co=c2h3coc4h8-3                1.000E+11    0.00    7800.0 !
Addition of c=o rad to c of c=c
                                                                    !
Analogy with c3h6+ch3co=c3h6coch3-2 from Curran

!*********************************
! c2h3coc5h11
!*********************************

c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-5+h2o        8.450E+11    0.00    -228.0 !
c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-5+h2o2      2.000E+11    0.00    8698.0 !
c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-5+h2          4.460E+06    2.00    3200.0 !

c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-4+h2o        3.165E+07    1.64    -247.0 !
c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-4+h2o2      5.600E+12    0.00   17700.0 !
c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-4+h2          1.300E+06    2.40    4471.0 !

divinket+nc3h7=c2h3coc5h10-5            1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3 sur c de c=c
                                                                    !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                    !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
c5h10+c2h3co=c2h3coc5h10-4              1.000E+11    0.00    7800.0 !
Addition of c=o rad to c of c=c
                                                                    !
Analogy with c3h6+ch3co=c3h6coch3-2 from Curran


!*********************************
! c2h3coc6h13
!*********************************

c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-6+h2o        8.450E+11    0.00    -228.0 !
c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-6+h2o2      2.000E+11    0.00    8698.0 !
c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-6+h2          4.460E+06    2.00    3200.0 !

c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-5+h2o        3.165E+07    1.64    -247.0 !
c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-5+h2o2      5.600E+12    0.00   17700.0 !
c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-5+h2          1.300E+06    2.40    4471.0 !

divinket+pc4h9=c2h3coc6h12-6            1.320E+04    2.48    6130.0 !
addition de ch3 sur c de c=c
                                                                    !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9
                                                                    !
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
c6h12-1+c2h3co=c2h3coc6h12-5            1.000E+11    0.00    7800.0 !
Addition of c=o rad to c of c=c
                                                                    !
Analogy with c3h6+ch3co=c3h6coch3-2 from Curran

!*********************************
! ch3chco
!*********************************


ch3chco+oh=c2h5+co2                     1.730E+12    0.00   -1010.0
ch3chco+oh=ch3choh+co                   2.000E+12    0.00   -1010.0
ch3chco+h=c2h5+co                       4.400E+12    0.00    1459.0
ch3chco+o=ch3hco+co                     3.200E+12    0.00    -437.0
```

```
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€    SOUS mECANISmE DES NAPhTENES
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€ à utiliser pour toutes les espèces
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€


c4h6+c2h3=c6h9                          2.000E+11    0.00    5000.0 !
(SChARFE 85)
c4h6+c2h3=chD13+h                       7.000E+11    0.00    1650.0 !
(96LIN/SKESIC>)

Fc6h9-13=cyc6h9                         1.000E+08    0.86    5900.0 !
c6h9=chxe1rD                            1.000E+08    0.86    5900.0 !

!****************************
! cyc6h9 cyclohexenyl radical
!****************************

!cyc6h9+o2=chD13+ho2                     1.000E+09   0.0       0.0 !
(PITZ96Cc4h7-1>c4h6)
!!cyc6h9+o2=chD13+ho2                     2.000E+09   0.0   -1506.0 !
idem Cc4h7-1+o2=c4h6+ho2


cyc6h9+ho2=chD13+h2o2                   1.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+ho2)
cyc6h9+oh=chD13+h2o                     1.800E+13    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+oh)
cyc6h9+o2=ho2+chD13                     9.600E+12    0.00   15160.0 !
Dayma
cyc6h9=h+chD13                          3.000E+13    0.00   50500.0 !
Dayma
cyc6h9+o=chD13+oh                       1.800E+13    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+o)
cyc6h9+h=chD13+h2                       3.160E+13    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+h)
cyc6h9+ch3=chD13+ch4                    8.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+ch3)
cyc6h9+c2h3=chD13+c2h4                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h5)
cyc6h9+c2h5=chD13+c2h6                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h5)
cyc6h9+ac3h5=chD13+c3h6                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h5)
cyc6h9+sc3h5=chD13+c3h6                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h5)
cyc6h9+tc3h5=chD13+c3h6                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h5)
cyc6h9+hco=chD13+ch2o                   4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h5)
cyc6h9+ch3o=chD13+ch3oh                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+c2h5)

cyc6h9+ho2=cyc6h9o+oh                   7.000E+12    0.00   -1000.0 !
cyc6h9+ho2=>cyc5h8+hco+oh               4.500E+12    0.00       0.0 !
(=EST)
```

```
cyc6h9+o=cyc5h8+hco                     8.256E+13    0.00       0.0 !
(=cyc5h11)
!cyc6h9+o2=acrol+ch2ch2hco                3.010E+10    0.00    2870.0 !
(EST/c3h3+o2)
cyc6h9+o2=acrol+c2h4+ hco               3.010E+10    0.00    2870.0 !
(EST/c3h3+o2)
cyc6h9+o2=ac3h5co+c2h4o                 1.310E+10    0.00       0.0 !

! Réactivité de basse température

cyc6h9+o2=chxe1qjC                      2.430E+39   -8.96    8620.0 !
idem ac3h5+o2 Lee Bozelli
chxe1qjC=Echxe1qC                       2.139E+09    1.00   28226.6 !
Exgas-handford cycle à 6
Echxe1qC+o2=chxe1qCqjE                  1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003
chxe1qCqjE=chxe1oCqE+oh                 1.070E+09    1.00   26226.6 !
Exgas-handford cycle à 6
oh+chxe1oCojE=chxe1oCqE                 1.810E+13    0.00       0.0 !
Dc6e5oAoC=chxe1oCojE                    1.000E+08    0.86    5900.0 !
Ring opening step - but write in reverse, therefore defining ring
closing here
                                                                    !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
Fc6e3oAoE=chxe1oCojE                    1.000E+08    0.86    5900.0 !
Ring opening step - but write in reverse, therefore defining ring
closing here
                                                                    !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.

Dc6e5oAoC+o=acrol+hcoch2co              2.000E+14    0.00       0.0 !
idem c5h7
Dc6e5oAoC+ho2=oh+acrol+hcoch2co         1.000E+13    0.00       0.0 !

ch2co+ac3h4hco1=Fc6e3oAoE               2.000E+11    0.00    2010.0 !
Addition of vinyl rad to internal c of c=c=o
                                                                    !
Analogy with c2h4+c2h3 from Weissman and Benson IJCK (1989),
                                                                    !
Benson says Ea is lower limit



!****************************
! chxe1rD cyclohexen-3-yl radical
!****************************

chxe1rD=cyc6h9                          1.300E+13    0.00   44500.0 !
Dayma

chxe1rD=Ac6h9-15                        2.000E+13    0.00   35500.0 !
Dayma
chxe1rD+o2=ho2+chD13                    9.600E+12    0.00    2500.0 !
Dayma
chxe1rD=h+chD13                         3.200E+13    0.00   34500.0 !
Dayma
chxe1rD+o2=ho2+chD14                    9.600E+12    0.00    5000.0 !
Dayma
chxe1rD=h+chD14                         3.000E+13    0.00   33800.0 !
Dayma


!****************************
! cyc6h9o cyclohexenoxy radical
```

```
!****************************


Fc6e5oA=cyc6h9o                       1.000E+08    0.86    5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.
c2h2+c3h6cho-1=Fc6e5oA             7.770E+06    1.41    7755.0 !
Addition of ch3 to c2h2
                                                                    !
Analogy with c2h2+ch3 Kislitsyn, Slagle & Knyazev, 29th Symp (2002)

Fc6e2oA=cyc6h9o                       1.000E+08    0.86    5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.
c2h4+sc3h5co=Fc6e2oA                  1.320E+4     2.48    6130.0 !
Addition of "c2h5" type radical to c of c=c
                                                                    !
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9, Table 3 from h.J. Curran
                                                                    !
Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)
sc3h5co=sc3h5+co                      8.600E+15    0.00   23000.0


!****************************
! Fc6h9-13 ch2=ch-ch=ch-ch2-ch2(.) radical
!****************************


Fc6h9-13+o2=hex135+ho2                2.700E+11    0.00    2500.0 !
Dayma
Fc6h9-13=hex135+h                     3.200E+13    0.00   34800.0 !
Dayma
Fc6h9-13=nc4h5+c2h4                   2.000E+13    0.00   35500.0 !
Dayma
Fc6h9-13+h=c6h10-13                   1.000E+14    0.00       0.0 !
Dayma

!****************************
! c6h9 ch2=ch-ch(.)-ch2-ch=ch2 radical
!****************************

c6h9=h+hex135                         3.200E+13    0.00   40700.0 !
Dayma
c6h9+o2=ho2+hex135                    1.600E+12    0.00   15160.0 !
Dayma

!*****************************************
! Ac6h9-15 ch(.)=ch-ch2-ch2-ch=ch2 radical
!*****************************************

Ac6h9-15=c6h9                          6.000E+08    1.00   12400.0 !
Dayma

Ac6h9-15=c2h2+Dc4h7-1                 2.000E+13    0.00   33000.0 !
Dayma
Ac6h9-15+o2=Dc4h7-1+co+ch2o           4.500E+16   -1.39    1000.0 !
Dayma
Ac6h9-15+h=c6h10-15                   1.000E+14    0.00       0.0 !
Dayma

!*********************
! cyclohexadiene
```

```
!*********************
hex135=chD13                          4.500E+12    0.00   43300.0 !
Dayma 2003

chD13=c6h6+h2                         5.000E+14    0.0   65140.0 !
(FITNIST 97)
chD13=c6h7C+h                         5.010E+15    0.0   72598.0 !
(85DEAN)
chD13+o2=c6h7C+ho2                    8.310E+11    0.0   24858.0 !
(85mUL/LOU)
chD13+ho2=c6h7C+h2o2                  4.000E+12    0.0   17057.0 !
(EST/WALKER77)
chD13+oh=c6h7C+h2o                    5.600E+12    0.0     861.0 !
(EST/WALKER77)
chD13+o=c6h7C+oh                      1.400E+13    0.0    -795.0 !
(87CVE)
chD13+h=c6h7C+h2                      1.300E+13    0.0    4445.0 !(2
*c4h8+h/89LOS)
chD13+ch3=c6h7C+ch4                   1.230E+11    0.0    5201.0 !
(=chD13+c2h5)
chD13+c2h5=c6h7C+c2h6                 1.230E+11    0.0    5201.0 !
(72KER/PAR)
chD13+c2h2=c6h6+c2h4                  3.090E+10    0.0   27151.0 !
(82hUY/LEE*RTI)
chD13+c2h3=c6h7C+c2h4                 1.230E+11    0.0    5201.0 !
(=chD13+c2h5)
chD13+ac3h5=c6h7C+c3h6                1.230E+11    0.0    5201.0 !
(=chD13+c2h5)
chD13+hco=c6h7C+ch2o                  1.230E+11    0.0    5201.0 !
(=chD13+c2h5)
chD13+ch3o=c6h7C+ch3oh                1.230E+11    0.0    5201.0 !
(=chD13+c2h5)
chD13+nc4h5=c6h7C+c4h6                1.000E+11    0.0   13500.0 !
(ac3h5)
chD13+ic4h5=c6h7C+c4h6                1.000E+11    0.0   13500.0 !
(ac3h5)

chD14=c6h6+h2                         2.300E+12    0.00   43800.0 !
Dayma
chD14=c6h7C+h                         3.100E+14    0.00   77400.0 !
Dayma
chD14+o2=c6h7C+ho2                    7.200E+12    0.00   27920.0 !
Dayma
chD14+ho2=c6h7C+h2o2                  1.280E+04    2.60   12400.0 !
Dayma
chD14+h=c6h7C+h2                      1.100E+05    2.50   -1900.0 !
Dayma
chD14+oh=c6h7C+h2o                    6.000E+06    2.00   -1520.0 !
Dayma
chD14+ch3=c6h7C+ch4                   2.000E+11    0.00    7300.0 !
Dayma



!******************************
! c6h7C cyclohexadienyl radical
!******************************

c2h2+nc4h5(+m)=c6h7C(+m)              4.800E+07    0.30    4700.0 !
                                LOW / 5.200E+25   -4.21    4000.0/

c6h7C=>c6h6+h                         1.000E+10    0.00       0.0 !
c6h7C+o2=c6h6+ho2                     1.000E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h9)
```

```
c6h7C+ho2=c6h6+h2o2                   1.000E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+ho2)
c6h7C+oh=c6h6+h2o                     6.020E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+oh)
c6h7C+o=c6h6+oh                       1.800E+13    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+o)
c6h7C+h=c6h6+h2                       3.160E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+h)
c6h7C+ch3=c6h6+ch4                    1.000E+13    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+ch3)
c6h7C+c2h3=c6h6+c2h4                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+c2h3)
c6h7C+c2h5=c6h6+c2h6                  4.000E+12    0.00       0.0 !
(=c6h7C+c2h3)
c6h7C+ac3h5=c6h6+c3h6                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=c6h7C+c2h3)
c6h7C+sc3h5=c6h6+c3h6                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=c6h7C+c2h3)
c6h7C+tc3h5=c6h6+c3h6                 4.000E+12    0.00       0.0 !
(=c6h7C+c2h3)
c6h7C+hco=c6h6+ch2o                   4.000E+12    0.00       0.0 !
(=c6h7C+c2h3)
c6h7C+c6h7C=c6h6+chD13                8.400E+10    0.00    -300.0 !
DACOSTA2003

c6h7C+h=c6h615+h2                     2.000E+13    0.00       0.0 !

c6h7C+ho2=>CPD+hco+oh                 4.500E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+ho2)
c6h7C+o=CPD+hco                       8.256E+13    0.00       0.0 !
(=cyc6h9+o)

!********************
! cyc5h8 cyclopentene
!********************

cyc5h8=c3h6+c2h2                      2.500E+13    0.00   62970.0 !
(DV)
cyc5h8=CPD+h2                         1.580E+13    0.00   59780.0 !
(FIT 09/06/96)
cyc5h8+o2=cyc5h7+ho2                  1.280E+10    0.00   25000.0 !
(=4/5cyc6h10)
cyc5h8+ho2=cyc5h7+h2o2                1.600E+11    0.00   17060.0 !
(=4/5cyc6h10)
cyc5h8+oh=cyc5h7+h2o                  4.800E+13    0.00     300.0 !
(=4/5cyc6h10)
cyc5h8+o=cyc5h7+oh                    2.784E+11    0.00    2508.0 !
(=4/5cyc6h10)

!****************************
! cyc5h7 cyclopentenyl radical
!****************************

cyc5h7=ac3h4+c2h3                     3.160E+14    0.00   37000.0 !
(DV)
cyc5h7=CPD+h                          3.160E+15    0.00   36000.0 !
(mARINOV 96)
cyc5h7=c5h7                           2.000E+13    0.00   30000.0 !
(08/09/2000)
cyc5h7+o2=acrol+ch2hco                4.000E+10    0.00    5000.0 !
(08/09/2000)
cyc5h7+o2=CPD+ho2                     1.010E+12    0.00   13353.0 !
(=ac3h5+o2/TSA91)
cyc5h7+ho2=CPD+h2o2                   2.650E+12    0.00       0.0 !
```

```
(=Cc4h7-1+ho2)
cyc5h7+oh=CPD+h2o                     6.020E+12    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+oh)
cyc5h7+o=CPD+oh                       1.800E+13    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+o)
cyc5h7+h=CPD+h2                       3.160E+13    0.00       0.0 !
(=Cc4h7-1+h)

!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€       SOUS mECANISmE DES NAPhTENES
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€


!********************************************
!********************************************
! Cyclohexane dérivés
!********************************************
!********************************************

cyc6h12=3c2h4                         8.224E+17    0.00   87225.0
cyc6h12=cyc6h11+h                     3.000E+16    0.00   95000.0


cyc6h12+o2=cyc6h11+ho2                7.500E+13    0.00   49000.0
cyc6h12+ho2=cyc6h11+h2o2              1.200E+13    0.00   17057.0
cyc6h12+oh=cyc6h11+h2o                1.600E+07    2.00    -681.0
cyc6h12+o=cyc6h11+oh                  1.540E+14    0.00    4497.0
cyc6h12+h=cyc6h11+h2                  6.000E+14    0.00    8373.0
cyc6h12+ch3=cyc6h11+ch4               1.350E+12    0.00    9540.0
cyc6h12+c2h5=cyc6h11+c2h6             1.350E+12    0.00    9540.0
cyc6h12+c2h3=cyc6h11+c2h4             1.350E+12    0.00    9540.0
cyc6h12+ac3h5=>cyc6h11+c3h6            1.350E+12    0.00    9540.0
cyc6h12+sc3h5=cyc6h11+c3h6            1.350E+12    0.00    9540.0
cyc6h12+tc3h5=cyc6h11+c3h6            1.350E+12    0.00    9540.0
cyc6h12+Cc4h7-1=>cyc6h11+c4h8          7.000E+11    0.00    9540.0
cyc6h12+hco=cyc6h11+ch2o              1.350E+12    0.00    9540.0
cyc6h12+ch3o=cyc6h11+ch3oh            4.320E+11    0.00    4473.0


!************************************
!**** Radical cyclohexyle cyc6h11 ****
!************************************

!cyc6h11+o2=cyc6h10+ho2                8.000E+12    0.00   10000.0 !
Ristori 2000
cyc6h11+o2=cyc6h10+ho2                1.000E+09    0.00    3000.0 !
Cavalotti

cyc6h11+o=cyc6h10+oh                  9.640E+13    0.00       0.0 !
(88TSA/nc3h7+o)
cyc6h11+ho2=cyc6h10+h2o2              2.000E+12    0.00    2000.0 !
(2*pc4h9+ho2)
cyc6h11+oh=cyc6h10+h2o                4.800E+13    0.00       0.0 !
(2*pc4h9)
cyc6h11+h=cyc6h10+h2                  2.000E+11    0.00       0.0 !
(=2pc4h9+h)
cyc6h11+ch3=cyc6h10+ch4               4.000E+12    0.00       0.0 !
```

```
(=2pc4h9+ch3)
cyc6h11+c2h3=cyc6h10+c2h4               4.000E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+c2h5=cyc6h10+c2h6               4.000E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+ac3h5=cyc6h10+c3h6              4.000E+11    0.00       0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+sc3h5=cyc6h10+c3h6              4.000E+11    0.00       0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+tc3h5=cyc6h10+c3h6              4.000E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+hco=cyc6h10+ch2o                4.000E+12    0.00       0.0 !
(=cyc6h11+ch3)

cyc6h11=cyc6h10+h                       5.000E+12    0.00   40000.0 !
Ristori 2000

!Réactivité de basse température

!cyc6h11+o2=chxqjA                       1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003
cyc6h11+o2=chxqjA                       1.500E+09    0.00       0.0 !
Cavalotti

chxqjA=cyc6h10+ho2                      2.850E+12    0.00   29000.0 !
!chxqjA=chxqArC                          1.860E+11    0.00   24077.0 !
chxqjA=chxqArC                          4.278E+09    1.00   28226.6 !
chxqArC=chxo-AC+oh                      1.400E+12    0.00   20000.0 !
chxqArC+o2=chxqAqjC                     1.840E+45  -11.10    6538.0 !
DeSain 2003
!chxqAqjC=oh+chxoAqC                     4.640E+10    0.00   21076.6 !
chxqAqjC=oh+chxoAqC                     1.070E+09    1.00    24365.9 !
!chxqAqjC=chxqAqCrE                      9.280E+10    0.00   21076.6 !
chxqAqjC=chxqAqCrE                      2.139E+09    1.00   28226.6 !
chxoAqC=chxoAojC+oh                     1.500E+16    0.00   42000.0 !

Fc6oAoC=chxoAojC                        1.000E+08    0.86    5900.0 !
c2h4+ch2coch2hco=Fc6oAoC                1.320E+04    2.48    6130.0 !
ch2co+ch2hco=ch2coch2hco                1.760E+04    2.48    6130.0 !
Fc6oAoE=chxoAojC                        1.000E+08    0.86    5900.0 !
ch2co+c3h6cho-1=Fc6oAoE             1.320E+04    2.48    6130.0 !

c6e5oAqC+oh=chxqAqCrE                   4.760E+07    1.54   34700.0 !
c6e5oAojC+oh=c6e5oAqC                   1.810E+13    0.00       0.0 !
ac3h5hco+ch2hco=c6e5oAojC               1.000E+11    0.00    3496.0 !

chxo-AC+oh=Cchxone+h2o                  3.400E+06    1.90   -1451.0 !
chxo-AC+h=Cchxone+h2                    1.200E+06    2.40    2583.0 !
chxo-AC+ch3=Cchxone+ch4                 1.790E+04    2.33    6147.0 !
chxo-AC+ho2=Cchxone+h2o2                3.000E+04    2.50   12260.0 !


!******************************
!**** Cyclohexène cyc6h10 ****
!******************************

! retro-Diels-Alder
cyc6h10=c4h6+c2h4                       1.500E+15    0.00    66900.0 !
Dayma 2003 retro Diels-Alder

! initiation

cyc6h10+o2=cyc6h9+ho2                   7.200E+13    0.00   34800.0 !
Dayma
```

```
cyc6h10+o2=chxe1rD+ho2                  4.000E+13    0.00   50700.0 !
Dayma

cyc6h10=cyc6h9+h                        1.200E+15    0.00   83200.0 !
Dayma
cyc6h10=chxe1rD+h                       1.200E+15    0.00   98900.0 !
Dayma

cyc6h10=chD13+h2                        5.000E+13    0.00   61700.0 !
Dayma 2003


! metathesis

!cyc6h10              = cyc6h9 +       h         5.010E+15   0.0
81700.0 !(85DEAN)
!cyc6h10 +     o2      = cyc6h9 +     ho2         1.580E+10   0.0
25000.0 !(75ShA/DEN)
!cyc6h10 +    ho2      = cyc6h9 +    h2o2         2.000E+11   0.0
17060.0 !(=2* C4h8+hO2)
!cyc6h10 +     oh      = cyc6h9 +     h2o         6.000E+13   0.0
300.0 !(ESTImEE)
!cyc6h10 +      o      = cyc6h9 +      oh         3.230E+13   0.0
2508.0 !(=cyc6h10+h)
!cyc6h10 +      h      = cyc6h9 +      h2         3.200E+13   0.0
2508.0 !(75hOY/PRE)
!cyc6h10 +    ch3      = cyc6h9 +     ch4         1.650E+11   0.0
4118.0 !(ESTImEE)
!cyc6h10 +   c2h3      = cyc6h9 +    c2h4         1.650E+11   0.0
4118.0 !(=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 +   c2h5      = cyc6h9 +    c2h6         1.650E+11   0.0
4118.0 !(=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 +  ac3h5      = cyc6h9 +    c3h6         1.650E+11   0.0
4118.0 !(=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 +  sc3h5      = cyc6h9 +    c3h6         1.650E+11   0.0
4118.0 !(=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 +  tc3h5      = cyc6h9 +    c3h6         1.650E+11   0.0
4118.0 !(=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 +    hco      = cyc6h9 +    ch2o         1.650E+11   0.0
4118.0 !(=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 +   ch3o      = cyc6h9 +   ch3oh         1.650E+11   0.0
4118.0 !(=cyc6h10+ch3)


cyc6h10+o=cyc6h9+oh                     1.800E+11    0.70    3250.0 !
Dayma
cyc6h10+h=cyc6h9+h2                     1.100E+05    2.50   -1900.0 !
Dayma
cyc6h10+oh=cyc6h9+h2o                   6.000E+06    2.00   -1520.0 !
Dayma
cyc6h10+ho2=cyc6h9+h2o2                 1.300E+04    2.60   12400.0 !
Dayma
cyc6h10+ch3=cyc6h9+ch4                  2.000E+11    0.00    7300.0 !
Dayma
cyc6h10+c2h3=cyc6h9+c2h4                2.000E+11    0.00    7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+c2h5=cyc6h9+c2h6                2.000E+11    0.00    7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+ac3h5=cyc6h9+c3h6               2.000E+11    0.00    7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+sc3h5=cyc6h9+c3h6               2.000E+11    0.00    7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+tc3h5=cyc6h9+c3h6               2.000E+11    0.00    7300.0 !
=cyc6h10+ch3
```

```
cyc6h10+hco=cyc6h9+ch2o                 2.000E+11    0.00    7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+ch3o=cyc6h9+ch3oh               2.000E+11    0.00    7300.0 !
=cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+c2h3=cyc6h9+c2h4               1.650E+11    0.00    4118.0
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+c2h5=cyc6h9+c2h6               1.650E+11    0.00    4118.0
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+ac3h5=cyc6h9+c3h6              1.650E+11    0.00    4118.0
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+sc3h5=cyc6h9+c3h6              1.650E+11    0.00    4118.0
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+tc3h5=cyc6h9+c3h6              1.650E+11    0.00    4118.0
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+hco=cyc6h9+ch2o                1.650E+11    0.00    4118.0
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+ch3o=cyc6h9+ch3oh              1.650E+11    0.00    4118.0
! =cyc6h10+ch3


cyc6h10+o=chxe1rD+oh                    5.200E+13    0.00    5200.0 !
Dayma
cyc6h10+h=chxe1rD+h2                    1.800E+07    2.00    5000.0 !
Dayma
cyc6h10+oh=chxe1rD+h2o                  5.200E+06    2.00    -770.0 !
Dayma
cyc6h10+ho2=chxe1rD+h2o2                8.000E+11    0.00   15500.0 !
Dayma
cyc6h10+ch3=chxe1rD+ch4                 4.000E+11    0.00    9600.0 !
Dayma


!******************************
!**** Cyclohexanone chxone ****
!******************************

chxone+oh=Bchxone+h2o                   1.690E+12     0.00   -228.0 !
idem butanone*2
chxone+h=Bchxone+h2                     8.920E+06     2.00   3200.0 !
idem butanone*2
chxone+o2=Bchxone+ho2                   3.100E+13     0.00  41970.0 !
idem butanone*2
chxone+ho2=Bchxone+h2o2                 4.000E+11     0.00   8698.0 !
idem butanone*2
chxone+ch3=Bchxone+ch4                  3.480E+00     3.46   3680.0 !
idem butanone*2
chxone+o=Bchxone+oh                     6.140E+13     0.00   3400.0 !
idem butanone*2

chxone+oh=Cchxone+h2o                   1.100E+13     0.00    790.0 !
idem pch
chxone+h=Cchxone+h2                     2.600E+06     2.40   2583.0 !
idem pch
chxone+o2=Cchxone+ho2                   1.400E+13     0.00  49910.0 !
idem pch
chxone+ho2=Cchxone+h2o2                 1.928E+04     2.60  13910.0 !
idem pch
chxone+ch3=Cchxone+ch4                  3.020E+00     3.50   5481.0 !
idem pch
chxone+o=Cchxone+oh                     1.100E+06     2.50   2830.0 !
idem pch

chxone+oh=Dchxone+h2o                   5.500E+12     0.00    790.0 !
idem pch
```

```
chxone+h=Dchxone+h2                     1.300E+06     2.40   2583.0 !
idem pch
chxone+o2=Dchxone+ho2                   7.000E+12     0.00  49910.0 !
idem pch
chxone+ho2=Dchxone+h2o2                 9.514E+03     2.60  13910.0 !
idem pch
chxone+ch3=Dchxone+ch4                  1.510E+00     3.50   5481.0 !
idem pch
chxone+o=Dchxone+oh                     5.500E+05     2.50   2830.0 !
idem pch

!******************************
!**** Cyclohexanone Xchxone ****
!******************************

Bchxone=h+chxe2oA                       1.200E+13     0.00  38200.0 !
estimation walker
!Bchxone+o2=chxe2oA+ho2                  1.020E+12     0.00  22654.0 !
idem dc4h7-1
Bchxone+o2=chxe2oA+ho2                  1.000E+09     0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran

Fc6e1oC=Bchxone                         1.000E+08     0.86   5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                     !
Ring opening step.

Cchxone=h+chxe2oA                       1.200E+13     0.00  33820.0 !
estimation walker
Cchxone=h+chxe3oA                       1.200E+13     0.00  38115.0 !
estimation walker
Cchxone+o2=chxe2oA+ho2                  1.000E+09     0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
Cchxone+o2=chxe3oA+ho2                  1.000E+09     0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
!Cchxone+o2=ho2+chxe2oA                  1.020E+12     0.00  22654.0 !
idem dc4h7-1
!Cchxone+o2=ho2+chxe2oA                  9.600E+12     0.00    2500.0 !
!Cchxone+o2=ho2+chxe3oA                  9.600E+12     0.00    5000.0 !

c6e5oyA=Cchxone                         1.000E+08     0.86   5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                     !
Ring opening step.
Ac6e5oC=Cchxone                         1.000E+08     0.86   5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                     !
Ring opening step.
c2h4+ac3h5co=Ac6e5oC                    1.000E+11     0.00    7800.0 !
addition de c=o sur c de c=c
                                                                     !
analogy with c4h6+hco=c4h6cho1-43
                                                                     !
Curran, h. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K.
                                                                     !
Combustion and Flame 129:253-280 (2002).


Dchxone=h+chxe3oA                       1.200E+13     0.00  37315.0 !
estimation walker
Dchxone+o2=chxe3oA+ho2                  1.000E+09     0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
!Cchxone+o2=chxe3oA+ho2                  1.020E+12     0.00  22654.0 !
idem dc4h7-1
```

```
!Dchxone+o2=chxe3oA+ho2                  1.020E+12     0.00  22654.0 !
idem dc4h7-1
Ac6e5oB=Dchxone                         1.000E+08     0.86   5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.
ch2co+Dc4h7-1=Ac6e5oB                   3.330E+10    0.00    6397.0 !
Addition of ch3 to c of c=o
                                                                    !
Analogy with ch3cho + c2h5 = sc4h9o, Table XII
                                                                    !
h.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)

! Réactivité de basse température

Bchxone+o2=chxoqjB                      2.430E+39   -8.96    8620.0 !
Lee Bozelli
chxoqjB=DchxoqB                         3.720E+11    0.00   24076.6 !
Silke 2007
DchxoqB+o2=chxoqBqjD                    7.540E+12    0.00       0.0 !
DchxoqB=c6e5oAoB+oh                     5.500E+13    0.00   25500.0 !
Ribaucour rupture C-C et O-O
chxoqBqjD=chxoAoBqD+oh                  1.000E+16    0.00   43000.0 !

chxoAoBqD=chxoAoBojD+oh                 1.000E+16    0.00   43000.0 !

Fc6oAoDoE=chxoAoBojD                    1.000E+08     0.86   5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.
Fc6oAoCoD=chxoAoBojD                    1.000E+08     0.86   5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.

Fc6oAoDoE=ch2co+choch2ch2co             2.000E+13    0.00   21350.0 !
Fc6oAoCoD=c2h4+2co+ch2hco               2.000E+13    0.00   28700.0 !
etape lente=perte de CO

c6e5oAoB+oh=c6e5oyAoB+h2o               2.300E+10    0.73  -1100.0 !
idem ch3hco+oh
c6e5oAoB+h=c6e5oyAoB+h2                 4.100E+09    1.16    2405.0 !
idem ch3hco+h
c6e5oAoB+ho2=c6e5oyAoB+h2o2             3.000E+12    0.0    12000.0 !
idem ch3hco+ho2
c6e5oAoB+ch3=c6e5oyAoB+ch4              7.600E+00    3.4     3740.0 !
idem ch3hco+ch3
c6e5oAoB+o2=c6e5oyAoB+ho2               3.000E+13    0.0    39200.0 !
idem ch3hco+o2
c6e5oyAoB=c4h7co-1+co                   2.000E+13    0.00   28700.0 !
c6e5oyAoB+ho2=>c4h7co-1+co2+oh          2.000E+13    0.00       0.0

! c6e5oyA

c6e5oA+oh=c6e5oyA+h2o                   4.200E+12    0.00     500.0 !
c6e5oA+h=c6e5oyA+h2                     4.000E+13    0.00    4200.0 !
c6e5oA+ho2=c6e5oyA+h2o2                 1.000E+12    0.00   10000.0 !
c6e5oyA=Ec5h9-1+co                      2.000E+13    0.00   28700.0 !
c6e5oyA+ho2=>Ec5h9-1+co2+oh             2.000E+13    0.00       0.0 !

!c6e5oA+oh=h2o+c4h6+ch2hco               1.410E+07    1.80     974.0
!c6e5oA+ho2=h2o2+c4h6+ch2hco             1.200E+13    0.00   19400.0
!c6e5oA+ch3=ch4+c4h6+ch2hco              1.300E12     0.00   11600.0
!c6e5oA+h=h2+c4h6+ch2hco                 5.700E+07    2.00    7700.0
```

```
!c6e5oA+o=oh+c4h6+ch2hco                 4.360E+06    2.40    5500.0


!**********************************
!**** Cyclohex-2-énone chxe2oA ****
!**********************************

chxe2oA+o2=>Dchxe2oA+ho2                4.000E+12     0.00  40000.0 !
idem c4h8
chxe2oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2              1.000E+11     0.00  17060.0 !
idem c4h8
chxe2oA+oh=>Dchxe2oA+h2o                4.186E+06     2.00   -543.0 !
idem c4h8
chxe2oA+o=>Dchxe2oA+oh                  2.600E+12     0.00   4500.0 !
idem c4h8
chxe2oA+h=>Dchxe2oA+h2                  1.950E+13     0.00   4445.0 !
idem c4h8
chxe2oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4               1.000E+11     0.00   7300.0 !
idem c4h8


!**********************************
!**** Cyclohex-3-énone chxe3oA ****
!**********************************


chxe3oA+o2=>Dchxe2oA+ho2                4.000E+12     0.00  40000.0 !
idem c4h8
chxe3oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2              1.000E+11     0.00  17060.0 !
idem c4h8
chxe3oA+oh=>Dchxe2oA+h2o                4.186E+06     2.00   -543.0 !
idem c4h8
chxe3oA+o=>Dchxe2oA+oh                  2.600E+12     0.00   4500.0 !
idem c4h8
chxe3oA+h=>Dchxe2oA+h2                  1.950E+13     0.00   4445.0 !
idem c4h8
chxe3oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4               1.000E+11     0.00   7300.0 !
idem c4h8


!****************************************
!**** Cyclohex-4-yl-2-énone Dchxe2oA ****
!****************************************

!Dchxe2oA=h+che24one                    1.200E+13     0.00  34500.0 !
estimation walker
!Dchxe2oA=>h+che24one                   3.200E+13    0.00   34500.0 !
idem chxe1rD Dayma
!Dchxe2oA+o2=ho2+che24one               9.600E+12    0.00    2500.0 !
idem chxe1rD Dayma
Dchxe2oA+o2=ho2+che24one               5.900E+05    0.00       0.0 !
idem Cc5h9-1


!Dchxe2oA+o2=che24one+ho2               1.020E+12     0.00  22654.0 !
idem dc4h7-1

Ac6e3e5oB=Dchxe2oA                     1.000E+08     0.86   5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.
ch2co+nc4h5=Ac6e3e5oB                  2.000E+11    0.00    2010.0 !
Addition of vinyl rad to internal c of c=c=o
```

```
                                                                    !
Analogy with c2h4+c2h3 from Weissman and Benson IJCK (1989),
                                                                    !
Benson says Ea is lower limit

!*************************************
!**** 1,4-Cyclohexanedione chxoAoD ****
!*************************************

chxoAoD+oh=BchxoAoD+h2o                 3.380E+12    0.00    -228.0
chxoAoD+h=BchxoAoD+h2                   1.792E+07    2.00    3200.0
chxoAoD+ho2=BchxoAoD+h2o2               8.000E+11    0.00    8698.0

!*******************************************
!**** Cyclohexan-2-yl-1,4-dione BchxoAoD ****
!*******************************************

chxe2oAoD+h=BchxoAoD                    6.250E+11    0.51    2620.0 !
Addition of h atom across internal c of c=c
                                                                    !
Table 3 Int J Chem Kinet 38: 250-275 (2006)
c6e1oCoyF=BchxoAoD                      1.000E+08    0.86    5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.
c6e1oCoyF=co+pc2h4coc2h3                2.000E+13    0.00   28700.0 !


!******************************************
!**** 1,4-Cyclohex-2-enedione chxe2oAoD ****
!******************************************

chxe2oAoD+oh=Echxe2oAoD+h2o             1.690E+12    0.00    -228.0
chxe2oAoD+h=Echxe2oAoD+h2               8.960E+06    2.00    3200.0
chxe2oAoD+ho2=Echxe2oAoD+h2o2           4.000E+11    0.00    8698.0

!************************************************
!**** Cyclohex-2-en-5-yl-1,4-dione Echxe2oAoD ****
!************************************************


!c6h4o2+h=Echxe2oAoD                     6.250E+11    0.51    2620.0 !
Addition of h atom across internal c of c=c
!                                                                    !
Table 3 Int J Chem Kinet 38: 250-275 (2006)
Echxe2oAoD=>c6h4o2+h                    1.000E+10    0.00       0.0 !
idem c6h7C=>c6h6+h
c6e2e5oyAoD=Echxe2oAoD                  1.000E+08    0.86    5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK  35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
                                                                    !
Ring opening step.
c6e2e5oyAoD=co+c2h3co+c2h2              2.000E+13    0.00   28700.0 !


!*******************************************
!*******************************************
! mEThYLCYCLOhEXANE dérivés
!*******************************************
!*******************************************



!*******************************************
!*******************************************
```

```
!  EThYLCYCLOhEXANE dérivés
!*******************************************
!*******************************************


!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€    SOUS mECANISmE DES mONOAROmATIQUES
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
!€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€
€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€€


!*******************************************************************
************************
!*******************************************************************
************************
!************************************** cyCLE FORmATION
**************************************
!*******************************************************************
************************
!*******************************************************************
************************

!************************
! hexa-1,5-diyne formation
!************************

c3h3+c3h3=c6h615                       4.000E+12    0.00       0.0 !
(LINDST95/2.5)

!************************
! hexa-1,5-diyne reactions
!************************

c6h615=hex1245                         1.800E+11    0.00   35804.0 !
(LINDST95/3)
hex1245=mc6h6                          5.000E+11    0.00   22081.0 !
(LINDST95)
mc6h6=FULVENE                          4.260E+13    0.00   49282.0 !
(LINDST95)
mc6h6=c6h6                             3.790E+13    0.00   22000.0 !
(EST 31/08/95)
!FULVENE=c6h6                           5.500E+13    0.00   66080.0 !
(81GAY/GIL*RTI*57-12)



!*******************************************************************
************************
!*******************************************************************
************************
!************************ cyCLOPENTADIENE AND DERIVATES REACTIONS
************************
!*******************************************************************
************************
!*******************************************************************
```

```
************************


!******************************
! CPD cyclopentadiene reactions
!******************************

CPD+o2=c5h5+ho2                         2.000E+13    0.00   25000.0 !
(EmD/BRE 92)
CPD+ho2=c5h5+h2o2                       2.000E+12    0.00   11660.0 !
(EmD/BRE 92)
CPD+oh=c5h5+h2o                         3.430E+09    1.18    -447.0 !
(EmD/BRE 92)
CPD+h=c5h5+h2                           2.190E+08    1.77    3000.0 !
(EmD/BRE 92)
CPD+h=c3h3+c2h4                         2.000E+14    0.00   10000.0 !
Fit 12/01/2001)
CPD+o=c5h5+oh                           1.810E+13    0.00    3080.0 !
(EmD/BRE 92)
CPD+ch3=c5h5+ch4                        3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)
CPD+c2h3=c5h5+c2h4                      3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)
CPD+c2h5=c5h5+c2h6                      3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)
CPD+nc4h5=c5h5+c4h6                     3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)
CPD+ic4h5=c5h5+c4h6                     3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)
CPD+c6h5=c5h5+c6h6                      3.110E+11    0.00    5500.0 !
(97BUR/DVI)
CPD+o2=>c3h4o+ch2co                     3.000E+08    0.00    3000.0 !
(21/07/2000)


!******************************
! c5h5 cyclopentadienyl radical
!******************************

c5h5+ho2=c5h5o+oh                       6.270E+29   -4.69   11650.0 !
Zhong Bozelli
c5h5+oh=c5h4oh+h                        9.000E+13    0.00       0.0 !
(EmD/BRE 92*3 15/01/2001)
c5h5+oh=c4h6+co                         4.000E+14    0.00    4500.0 !
(15/01/2001)
c5h5+h(+m)=CPD(+m)                      1.000E+14    0.00       0.0 !
(DAVIS 96 15/01/01)
                                  LOW / 4.400E+80  -18.28   12994.0/
                                  TROE / 0.068 400 4136 5500/
c5h5+o=c5h4o+h                          5.810E+13   -0.02      20.0 !
(Zhong JPC 1998)
c5h5+o=nc4h5+co                         2.000E+14    0.00       0.0 !
(EmD/BRE 92*2bak)


!****************************************
! c5h4oh hydroxycyclopentadienyl radical
!****************************************

c5h4oh=c5h4o+h                          2.100E+13    0.00   48000.0 !
(EmD/BRE 92)

!********************************
! c5h5o cyclopentadienoxy radical
```

```
!********************************

c5h5o=nc4h5+co                          2.510E+11    0.00   43900.0 !
(EmD/BRE 92)


!***********************************
! c5h4o reactions cyclopentadienone
!***********************************

c5h4o+h=nc4h5+co                        2.100E+61  -13.27   40810.0 !
(QRRK 12/01/01)
c5h4o=>co+c4h4                          1.000E+12    0.00   53000.0 !
(EmD/BRE 92*RTI*1076-7.5)

!c5h4 reactions
c5h4+h=c5h3+h2                          1.000E+06    2.50    5000.0 !
Alzueta
c5h4+o=c5h3+oh                          1.000E+06    2.50    3000.0 !
Alzueta
c5h4+oh=c5h3+h2o                        1.000E+07    2.00       0.0 !
Alzueta

!c5h3 reactions
c5h3+o2=c2h2+hcco+co                    1.000E+12    0.00       0.0 !
Alzueta


!*****************************************************************
************************
!*****************************************************************
************************
!****************************** BENZENE AND DERIVATES REACTIONS
******************************
!*****************************************************************
************************
!*****************************************************************
************************


!************************
! Benzene c6h6 reactions
!************************

c6h6+o2=c6h5+ho2                        6.310E+13    0.00   60014.0 !
Asaba et al., Proc. Int. Symp. Shock Tubes Waves 1971 (8) pp. 1-12
c6h6+ho2=c6h5+h2o2                      5.400E+04    2.50   27620.0 !
Scott Walker C&F 2002
c6h6+oh=c6h5+h2o                        1.200E+00    4.10    -301.1 !
Chen 2004
c6h6+h=c6h5+h2                          1.420E+08    1.77   13056.0 !
Violi 2004
c6h6+o=c6h5o+h                          6.220E+13   -0.16    4408.0 !
Chen 2004
c6h6+ch3=c6h5+ch4                       2.620E+13    0.00   19336.0 !
Hemelset 2006
c6h6+c2h5=c6h5+c2h6                     6.310E+11    0.00   14864.0 !
Zhang 1989
c6h6+c2h3=c6h5+c2h4                     4.080E-01    4.02    88023.0 !
Tokmatov 2007
rev / 9.440E-03  4.47  4470.0 /
c6h6+nc4h5=c6h5+c4h6                    4.100E-01    4.02    8803.0 !
idem c6h6+c2h3
c6h6+ic4h5=c6h5+c4h6                    4.100E-01    4.02    8803.0 !
```

```
idem c6h6+c2h3
c6h6+o=c6h5+oh                          2.000E+13    0.00   14700.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522

!***************
! c6h5 reactions
!***************

!c6h5 and c6h5o2 Reactions
c6h5+o=c5h5+co                          9.000E+13    0.0        0.0 !
Frank

!Chemact c6h5o2 Reactions:
c6h5+o2=c6h5o+o                         2.570E-29   12.73   -5699.0 !
DiNaro et al. 2000 J. Phys. Chem. A (104) pp. 10576-10586

!!!!!
nc4h3+c2h2=c6h5                         2.800E+03    2.90    1400.0 !
(mILLER 92)

c6h5+h=c6h6                             2.200E+14    0.00       0.0 !
(EmD/BRE 92)
c6h5+ho2=c6h5o+oh                       5.000E+13    0.00    1000.0 !
(BITTKER 91)
c6h5+oh=c6h5o+h                         5.000E+13    0.00       0.0 !
(mILLER 92)
c6h5+c2h=phc2h                          3.000E+08    0.00    1391.0 !
(TAN96)
c6h5+c2h2=phc2h+h                       2.360E+32   -5.30   23787.0 !
TOKMATOV
c6h5+c4h2=phc2h+c2h                     2.000E+13    0.00       0.0 !
(FRENKLACK 84)
c6h5+c4h4=phc2h+c2h3                    1.000E+13    0.00    7647.0 !
(96hEC/hIP*RTI)

c6h5+o2=c6h5o2                          1.860E+13   -0.217   -711.0 !
Da Silva and Bozelli 2008 J. Phys. Chem. A  vol. 112 pp. 3566-3575
c6h5o+o=c6h5o2                          2.810E+13   -0.197  -1935.0 !
Da Silva and Bozelli 2008 J. Phys. Chem. A  vol. 112 pp. 3566-3575

c6h5+c3h6=ac3h5+c6h6                    1.360E+00    3.82    1437.0 !
Park et al. 2006 J. Phys. Chem. A vol. 110 pp. 8729-8735

!************************
! Phenol c6h5oh reactions
!************************


oh+c6h5oh=h2o+c6h5o                     1.390E+08    1.43    -962.0 !
Shandross (1995)
c6h5oh+o=c6h5o+oh                       1.280E+13    0.00    2891.0 !
Frank
c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2                   3.000E+13    0.00   15000.0 !
c   =c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2
c6h5oh+nc4h5=c4h6+c6h5o                 3.000E+02    3.00    7650.0 !
c2h5oh*2 Marinov 1996
c6h5oh+ic4h5=c4h6+c6h5o                 6.000E+12    0.00       0.0 !
Emdee et al.
c6h5oh+c6h5=c6h6+c6h5o                  4.910E+12    0.00    4400.0 !
Emdee et al.

c6h5oh+h=c6h6+oh                        2.210E+13    0.00    7910.0 !
(EmD/BRE 92)
c6h5oh+h=c6h5o+h2                       1.150E+14    0.00   12400.0 !
(EmD/BRE 92)
```

```
c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4                    3.000E+02    3.00    7650.0 !
(c2h5oh*2 marinov 20/07/2000)
c6h5oh+c2h5=c6h5o+c2h6                  3.000E+02    3.00    7650.0 !
(c2h5oh*2 marinov 20/07/2000)
c6h5oh+c2h3=c6h5o+c2h4                  3.000E+02    3.00    7650.0 !
(c2h5oh*2 marinov 20/07/2000)

c6h5oh=CPD+co                           8.620E+15   -0.61  74122.6 !
Xu and Lin 2006 J; Phys. Chem. A vol. 110 pp. 1672-1677

!*******************************
! c6h5o phenoxy radical reactions
!*******************************

c6h5o+CPD=c5h5+c6h5oh                   3.160E+11    0.00    8000.0 !
Emdee et al.
c6h5o+o=c6h4o2+h                        3.000E+13    0.00       0.0 !
Frank
c6h5o=c5h5+co                           7.400E+11    0.00   43853.0 !
Frank highP 25th comb symp


c6h5o+h(+m)=c6h5oh(+m)                  2.500E+14    0.00       0.0 !
DAVIS 96 12/01/2001
                                  LOW / 1.000E+94  -21.84   13880.0 /
                                  TROE/ 0.043 304.0 60000.0  5900.0 /
c6h5o+h=CPD+co                          1.060E+53  -10.70   41360.0 !
ZhANG1995
c6h5o+o=c5h5+co2                        1.000E+13    0.00       0.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522

c6h5o2=c6h4o2+h                           4.000E+08    0.00   0.0 !
treated as adjustable parameter
c6h5o2=c5h5+co2                         1.200E+08    0.00       0.0 !
treated as adjustable parameter

!Estimated c6h5o2 reactions

c6h5o2+h=c6h5o2h                        2.500E+14    0.0        0.0 !
Same as c6h5o+h=c6h5oh
c6h5o+oh=c6h5o2h                        1.000E+12    0.0        0.0 !
Diffusion controlled
c6h5o2+ho2=c6h5o2h+o2                   1.867E+12    0.0     1540.0 !
(ho2+ho2=h2o2+o2)
c6h5o2+c6h5oh=c6h5o2h+c6h5o             1.000E+12    0.0     6961.0 !
estimated
c6h5o+ho2=c6h5o2+oh                     1.500E+14    0.0    23650.0 !
from co+ho2=co2+oh

!c6h4o2 submodel (Alzueta)

c6h4o2=c5h4+co2                         3.500E+12    0.00   67000.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
c6h4o2+h=>c5h5o+co                      2.500E+13    0.00    4700.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
c6h4o2+h=>c6h3o2+h2                     2.000E+12    0.00    8100.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
c6h4o2+oh=>c6h3o2+h2o                   1.000E+06    2.00    4000.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
c6h4o2+o=>c6h3o3+h                      1.500E+13    0.00    4530.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
c6h4o2+o=>c6h3o2+oh                     1.400E+13    0.00   14700.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
```

```
!c6h3o2 submodel (Alzueta)

c6h3o2+h=>c2h2+c2h2+co+co              1.000E+14    0.00       0.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
c6h3o2+o=>c2h2+hcco+co+co              1.000E+14    0.00       0.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522
c6h3o3=>c2h2+hcco+co+co                1.000E+12    0.00   50000.0 !
Alzueta et al. 2000 IJCK vol. 32 pp. 498-522


!****************************************
! che24one cyclohexa-2,4-dienone reactions
!****************************************

!c6h5o+h=che24one                       1.000E+14     0.00      0.0 !
ARENDS 1993
che24one=c6h5oh                        7.620E+09     0.86  51100.0 !
Zhu and Bozelli 2003 J. Phys. CHem. A (107) pp. 3696-3703
che24one=>c6h5o+h                      1.400E+15     0.00  54000.0 !
estimation Dean
che24one+h=cyc5h7+co                   2.510E+13     0.00   4700.0 !
ARENDS 1993

che24one+o2=c6h5o+ho2                  4.000E+12     0.00  40000.0 !
idem c4h8
che24one+ho2=c6h5o+h2o2                9.630E+03     2.60  13910.0 !
idem ach5cho
che24one+oh=c6h5o+h2o                  3.120E+06     2.00   -298.0 !
idem ach5cho
che24one+o=c6h5o+oh                    2.600E+12     0.00   4500.0 !
idem c4h8
che24one+h=c6h5o+h2                    1.950E+13     0.00   4445.0 !
idem c4h8
che24one+ch3=c6h5o+ch4                 1.000E+11     0.00   7300.0 !
idem c4h8

!*********************************************************************
************************
!*********************************************************************
************************
!****************************** toluenE AND OTHER C7 AROmATICS
******************************
!*********************************************************************
************************
!*********************************************************************
************************


!*****************
! toluen formation
!*****************

nc4h5+ac3h4=toluen+h                   2.000E+11    0.00    3700.0 !
(KERN 88)
nc4h5+pc3h4=toluen+h                   6.320E+11    0.00    3700.0 !
(84COL/BIT*2)

!*****************
! toluen reactions
!*****************

toluen+o2=phch2+ho2                    3.000E+14    0.00   43062.0 !
(ENG98/RTI)
toluen+h=c6h6+ch3                      2.400E+13    0.00    5123.0 !
(86ROB/TSA*DAG*2)
toluen+c2h5=phch2+c2h6                 1.008E+11    0.00    9514.0 !
(FITNIST)
toluen+c6h5=phch2+c6h6                 2.100E+12    0.00    4400.0 !
(92EmD/BRE)
toluen+nc4h5=phch2+c4h6                4.000E+12    0.00    7500.0 !
(RTI)
toluen+c2h3=phch2+c2h4                 4.000E+12    0.00    7500.0 !
(RTI)
toluen=c6h5+ch3                        4.300E+22   -1.73  104200.0 !
toluen=phch2+h                         2.090E+15    0.00   87507.0 !
toluen+ho2=phch2+h2o2                  1.020E+04    2.50   12340.5 !
Scott
toluen+oh=phch2+h2o                    1.770E+05    2.394   -602.0 !
Seta 2006 J.Phys.Chem.A vol.110 p.5081
toluen+oh=c6h5oh+ch3                   7.830E+02    2.884   3221.0 !
Seta 2006 J.Phys.Chem.A vol.110 p.5081
toluen+o=phch2+oh                      6.300E+11    0.00       0.0 !
Hoffmann et al. 1990 Z. Phys. Chem. (Neue Folge) vol. 168 pp. 1-12
toluen+h=phch2+h2                      6.470E+00    3.98    3384.0 !
Oehlsclager
toluen+ch3=phch2+ch4                   3.160E+11    0.00    9500.0 !

!*******************************
! phch2 benzyl radiacal reactions
!*******************************

phch2=c4h4+c3h3                        2.000E+14    0.00   83600.0 !
(COLKET/SEERY 94)
phch2=>c5h5+c2h2                       8.300E+12    0.37   75843.1 !
fit Cavalotti
phch2+ho2=phch2o+oh                    2.000E+13    0.00       0.0 !
Brezinsky * 4
!phch2+oh=phch2oh                       2.000E+13    0.00       0.0 !
(91hIP/REI)
!phch2+o=phhco+h                        1.580E+13    0.00       0.0 !
(84BRE/LIT)
phch2+o=c6h5+ch2o                      1.000E+13    0.00       0.0 !
(92EmD/BRE/8GP)
phch2+c3h3=toluen+c3h2                 1.000E+12    0.00       0.0 !
(BRAUN EST)
phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o              1.050E+11    0.00    9500.0 !
(92EmD/BRE)

phch2+o2=phch2o+o                      6.310E+12    0.00   42924.0 !
(84BRE/LIT)

phch2+o2=phch2o2                       8.276E+51  -12.57   14813.0 !
Murakami et al. 2007 fit 10atm
!phch2o2=phhco+oh                       1.290E+10    0.79   31810.0 !
idem phch2o2=phcho2h Canneaux et al J. Phys. CHem. A 2008
phch2o2=phhco+oh                       3.880E+68  -17.73   58456.0 !
Murakami et al. 2007 fit 10atm


!***********************************
! phch2oh Benzylic alcohol reactions
!***********************************

phch2oh+o2=>phhco+ho2+h                2.000E+14    0.00   41400.0 !
(92EmD/BRE)
phch2oh+oh=>phhco+h2o+h                8.430E+12    0.00    2583.0 !
(92EmD/BRE)
phch2oh+h=c6h6+ch2oh                   1.200E+13    0.00    5148.0 !
(92EmD/BRE)
phch2oh+phch2=>phhco+toluen+h          2.110E+11    0.00    9500.0 !
(92EmD/BRE)
phch2oh+c6h5=>phhco+c6h6+h             1.400E+12    0.00    4400.0 !
(92EmD/BRE)

!***********************************
! phch2o Benzyloxy radiacl reactions
!***********************************

phch2o=phhco+h                         1.270E+14    0.00    1103.0 !
(84BRE/LIT)

!*****************************
! phhco Benzaldehyde reactions
!*****************************

phhco=phco+h                           3.980E+15    0.00   83701.0 !
(86GRE/COL)
phhco+o2=phco+ho2                      1.020E+13    0.00   39000.0 !
(EST/ch2o+o2/2)
phhco+ho2=phco+h2o2                    2.000E+12    0.00   11665.0 !
(EST/ch2o+ho2/2)
phhco+oh=phco+h2o                      1.710E+09    1.18    -447.0 !
(92EmD/BRE)
phhco+oh=c6h5oh+hco                    1.200E+13    0.00    5123.0 !
(EST/toluen+h)
phhco+o=phco+oh                        9.040E+12    0.00    3080.0 !
(92EmD/BRE)
phhco+h=phco+h2                        5.000E+13    0.00    4928.0 !
(92EmD/BRE)
phhco+h=c6h6+hco                       1.200E+13    0.00    5148.0 !
(92EmD/BRE)
phhco+ch3=phco+ch4                     2.770E+03    2.81    5773.0 !
(92EmD/BRE)
phhco+c6h5=phco+c6h6                   7.010E+11    0.00    4400.0 !
(92EmD/BRE)

!*********************************
!  phco Benzoyle radical reactions
!*********************************

phco=c6h5+co                           3.980E+14    0.00   29401.0 !
(71SOL/BEN2)
phco+o2=c6h5o+co2                      3.000E+10    0.00    2870.0 !
(EST/c3h3+o2)
phco+ho2=>c6h5+co2+oh                  2.000E+13    0.00       0.0 !
(EST/RAD+ho2)

!*********************************************************************
************************
!*********************************************************************
************************
!************************************** C8 AROMATICS
**************************************
!*********************************************************************
************************
!*********************************************************************
************************


!******************************
! phc2h5 Ethylbenzene reactions
!******************************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) unimolecular intiations
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

phc2h5=c6h6+c2h4                       1.150E+09    0.00   51699.0 !
Clark and Price 1970 Can. J. Chem. vol. 48
phc2h5=styren+h2                       5.010E+12    0.00   63988.0 !
Clark and Price 1970 Can. J. Chem. vol. 48

!phc2h5=phch2+ch3                       5.000E+16    0.00   78127.0 !
Estimation Dean
!phc2h5=c6h5+c2h5                       5.000E+16    0.00  100399.0 !
Estimation Dean
!phc2h5=phch2+ch3                       1.000E+15    0.00   70000.0 !
FITNIST/RTI

!!phc2h5=Aphc2h4+h                       2.510E+15    0.00   83260.0
! 88MUL/TRO3 idBphc2h4 +2Kcal 09/10/2000
!!phc2h5=Bphc2h4+h                       8.000E+15    0.00   78127.0
! Estimation Dean
!phc2h5=Aphc2h4+h                       8.000E+15    0.00  100226.0 !
Estimation Dean

phc2h5=phch2+ch3                       8.910E+15    0.00   74720.0 !
Mizerka
phc2h5=c6h5+c2h5                       1.000E+16    0.00  100000.0 !
phc2h5=Bphc2h4+h                       2.510E+15    0.00   81262.0 !
88MUL/TRO3


!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) bimolecular intiations
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!phc2h5+o2=Aphc2h4+ho2                  4.000E+13    0.00   50620.0
!
!phc2h5+o2=Aphc2h4+ho2                  2.000E+13    0.00   52300.0 !
phc2h5+o2=>Bphc2h4+ho2                 4.000E+13    0.00   38220.0 !
!phc2h5+o2=Aphc2h4+ho2                  4.000E+13    0.00   48100.0 !
(Estimation Walker)
!phc2h5+o2=Bphc2h4+ho2                  4.000E+13    0.00   33300.0 !
(Estimation Walker)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) ipso addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

phc2h5+h=c2h5+c6h6                     2.400E+13    0.00    5123.0 !
86ROB/TSA*DAG*2 id toluen 06/10/2000

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) metathesis reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!phc2h5+h=Aphc2h4+h2                    7.200E+08    1.50    7412.0 !
Ellis 2003
!phc2h5+h=Bphc2h4+h2                    3.300E+07    2.00    5346.0 !
Ellis 2003

phc2h5+h=Bphc2h4+h2                    2.650E+02    3.44    1003.5 !
Baulch et al. 2005
phc2h5+h=Aphc2h4+h2                    2.350E+02    1.90    6637.2 !
Baulch et al. 2005
```

```
phc2h5+oh=Aphc2h4+h2o                  1.990E+07    1.80    1133.0 !
Cohen 1991, idem c2h6 mais divisé par 2
!phc2h5+oh=Bphc2h4+h2o                  7.090E+06    1.90   -1159.0 !
Cohen 1991, idem c3h8->ic3h7 mais E diminué de 1000 cal
phc2h5+oh=Bphc2h4+h2o                  4.800E+12    0.00       0.0 !
Baulch et al. 1992


phc2h5+o=Aphc2h4+oh                    4.998E+08    1.50    5802.0 !
Baulch 1994, idem c2h6 mais divisé par 2
!phc2h5+o=Bphc2h4+oh                    5.490E+05    2.50    2140.0 !
Tsang 1988, idem c3h8->ic3h7 mais E diminué de 1000 cal
phc2h5+o=Bphc2h4+oh                    2.230E+13    0.00    3795.5 !
Baulch et al. 2005

phc2h5+ho2=>Aphc2h4+h2o2                1.800E+04    2.50   16792.0 !
Scott 2002
phc2h5+ho2=>Bphc2h4+h2o2                6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott 2002

!phc2h5+ho2=Aphc2h4+h2o2                3.550E+04    2.50   16851.5 !
Baulch et al. 2005
!phc2h5+ho2=Bphc2h4+h2o2                6.200E+04    2.50   13522.9 !
Baulch et al. 2005

phc2h5+ch3=Aphc2h4+ch4                 2.745E-01    4.00    8287.0 !
Tsang 1986/Warnatz 1984, idem c2h6 mais divisé par 2
phc2h5+ch3=Bphc2h4+ch4                 7.505E-01    3.46    4485.0 !
Tsang 1988,  idem c3h8->ic3h7 mais E diminué de 1000 cal


!**************************************
! phc2h4 Ethylphenyle radical reactions
!**************************************


!Aphc2h4=styren+h                       3.160E+13    0.00   50670.0 !
88BRO/MUL idBphc2h4 09/10/2000
!Aphc2h4=c6h5+c2h4                      1.000E+14    0.00   35000.0 !
RTI 07/10/2000

Aphc2h4=styren+h                       3.790E+06    1.99   32106.0 !
Tokmakov
rev / 1.630E+06  2.16  1994.0/
c6h5+c2h4=Aphc2h4                      4.040E+03    2.64    1459.0 !
Tokmakov
rev / 1.717E+11  0.78  38704.0 /


!Bphc2h4=styren+h                       1.800E+13    0.00   47025.0 !
EST DEAN
Bphc2h4=styren+h                       3.740E+08    1.55   44609.0 !
Tokmakov
rev / 1.188E+07  1.925  -108.0 /

Bphc2h4+o2=styren+ho2                  1.580E+12    0.00   15200.0 !
Bphc2h4+o=c6h5+ch3hco                  1.600E+13    0.00       0.0 !
PENGLOAN
Bphc2h4+o=phhco+ch3                    1.600E+13    0.00       0.0 !
PENGLOAN
Bphc2h4+oh=phhco+ch4                   1.600E+13    0.00       0.0 !
PENGLOAN
Bphc2h4+ho2=>phhco+ch3+oh              5.000E+12    0.00       0.0 !
```

```
PENGLOAN

Aphc2h4=Bphc2h4                        5.950E+05    2.07   29582.0 !
Tokmakov
rev / 2.310E+07  1.74  44456.0 /


!*****************
! styren formation
!*****************

nc4h5+c4h4=styren+h                    3.160E+11    0.00    3700.0 !
EST nc4h5+pc3h4
c4h4+c4h4=styren                       1.480E+14    0.00   38003.0 !
84LUN/HEI
c6h5+c2h3=styren                       1.000E+13    0.00       0.0

!c6h5+c2h4=styren+h                     1.500E+45   -8.65   42426.7 !
Tokmakov 100atm
c6h5+c2h4=styren+h                     3.620E+28   -4.24   23866.3 !
Tokmakov 1atm

!*****************
! styren reactions
!*****************

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) unimolecular intiations
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren=c6h6+c2h2                       1.600E+11    0.00   58438.0 !
88MUL/TRO

styren=ASTYRYL+h                       5.000E+15    0.00  109400.0 !
THESE GAELLE
styren=BSTYRYL+h                       5.000E+15    0.00  109400.0 !
THESE GAELLE

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) bimolecular intiations
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren+o2=ASTYRYL+ho2                  4.000E+13    0.00   59800.0 !
THESE GAELLE
styren+o2=BSTYRYL+ho2                  4.000E+13    0.00   59800.0 !
THESE GAELLE

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) metathesis reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren+oh=ASTYRYL+h2o                  5.000E+12    0.00    6936.0 !
THESE GAELLE
styren+oh=BSTYRYL+h2o                  5.000E+12    0.00    5936.0 !
THESE GAELLE

styren+h=ASTYRYL+h2                    5.000E+13    0.00   15009.0 !
THESE GAELLE
styren+h=BSTYRYL+h2                    5.000E+13    0.00   14009.0 !
THESE GAELLE

styren+ho2=ASTYRYL+h2o2                7.500E+10    0.00   14190.0 !
THESE GAELLE
styren+ho2=BSTYRYL+h2o2                7.500E+10    0.00   13190.0 !
```

```
THESE GAELLE

styren+o=phch2+hco                     1.200E+08    1.40     530.0 !
THESE GAELLE
styren+o=c6h5+ch2hco                   6.000E+07    1.40     530.0 !
THESE GAELLE

styren+c6h5=ASTYRYL+c6h6               2.000E+11    0.00   20000.0 !
THESE GAELLE
styren+c6h5=BSTYRYL+c6h6               2.000E+11    0.00   19000.0 !
THESE GAELLE

styren+c6h5o=ASTYRYL+c6h5oh            2.000E+11    0.00   20000.0 !
THESE GAELLE
styren+c6h5o=BSTYRYL+c6h5oh            2.000E+11    0.00   19000.0 !
THESE GAELLE

styren+c5h5=ASTYRYL+CPD                2.000E+11    0.00   20000.0 !
THESE GAELLE
styren+c5h5=BSTYRYL+CPD                2.000E+11    0.00   19000.0 !
THESE GAELLE

styren+oh=c6h4c2h3+h2o                 1.630E+07    1.42    1454.0 !
MARINOV 1996
styren+h=>c6h4c2h3+h2                  1.900E+07    2.00    9698.0 !
ELLIS 2003



!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) decomposition by ho2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren+ho2 =>phch2+hco+oh              2.500E+12    1.00   25000.0 !
THESE GAELLE*3
styren+ho2 =>phhco+ch2+oh              2.500E+12    1.00   25000.0 !
THESE GAELLE*3


!!!!!!!!!!!!!!!!
! 7) ipso addition
!!!!!!!!!!!!!!!!

!styren+h=c6h6+c2h3                     7.900E+13    0.00    9990.4 !
pas sur mais on va dire que oui
styren+h=c6h6+c2h3                     2.400E+13    0.00    5123.0 !

!***************************
!  STYRYL radical reactions
!***************************

ASTYRYL+h=BSTYRYL+h                    1.000E+14    0.00       0.0 !
MARINOV 1996

ASTYRYL=c6h5+c2h2                      1.35E+14    0.34   45710.0 !
TOKMATOV 2003
ASTYRYL=phc2h+h                        3.800E+11    0.82   38910.0 !
TOKMATOV 2003
ASTYRYL+o2=phhco+hco                   2.000E+11    0.00   14000.0 !
THESE GAELLE
ASTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6                1.000E+13    0.00       0.0 !
THESE GAELLE

BSTYRYL+o2=phco+ch2o                   2.000E+11    0.00   14000.0 !
```

```
THESE GAELLE
BSTYRYL+o=c6h5+ch2co                   1.600E+13    0.00       0.0 !
THESE GAELLE
BSTYRYL=phc2h+h                        1.230E+13    0.55   42580.0 !
TOKMATOV 2003
BSTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6                1.000E+13    0.00       0.0 !
THESE GAELLE
ASTYRYL= BSTYRYL                       4.900E+12    0.45   45740.0 !
TOKMATOV 2003
                                 rev/ 6.610E+13    0.14   53120.0/ !
TOKMATOV 2003
BSTYRYL+oh=phc2h+h2o                   2.000E+13    0.00       0.0 !
MARINOV 1996
BSTYRYL+h=phc2h+h2                     5.000E+13    0.00       0.0 !
MARINOV 1996


!*******************
! phch2hco reactions
!*******************

phch2hco+o2=>phch2co+ho2               2.000E+13    0.50   42200.0 !
=ch3hco
phch2hco+ho2=>phch2co+h2o2             4.095E+04    2.50   10204.0 !
=ch3hco
phch2hco+oh=>phch2co+h2o               2.690E+08    1.35   -1574.0 !
=ch3hco
phch2hco+o=>phch2co+oh                 5.850E+12    0.00    1808.0 !
=ch3hco
phch2hco+h=>phch2co+h2                 4.095E+09    1.16    2404.0 !
=ethco
phch2hco+ch3=>phch2co+ch4              3.498E-08    6.21    1639.0 !
=ethco

phch2hco=>phch2+hco                    5.000E+16    0.00   71600.0 !
phch2hco+h=c6h6+ch2hco                 5.780E+13    0.00    8088.0 !

!****************************************
! phch2co PhenylAcetyle radical reactions
!****************************************

phch2co=phch2+co                       3.980E+14    0.00   29401.0 !
71SOL/BEN2
phch2co+o2=phch2o+co2                  3.000E+10    0.00    2870.0 !
EST/c3h3+o2
phch2co+ho2=>phch2+co2+oh              2.000E+13    0.00       0.0 !
EST/RAD+ho2

c6h5+ch2co=phch2co                     3.200E+04    2.40     489.0 !
Choi and Lin 2004 ChemPhysChem vol. 5 pp. 225-232

!****************************************
! phcoch2  radical reactions
!****************************************

!phcoch2=c6h5+ch2co                     2.000E+13    0.00   51940.0 !
EstimationSelonDean
c6h5+ch2co=phcoch2                     6.200E+19   -2.30   15083.0 !
Choi and Lin 2004 ChemPhysChem vol. 5 pp. 225-232

!*******************************
! PhenylAcetylene phc2h reactions
!*******************************
```

```
phc2h+oh=>c6h6+hcco                     2.000E+13    0.00       0.0
phc2h+h=c6h4c2h+h2                      5.000E+13   -0.48    1500.0 !
"OK"?
phc2h+oh=c6h4c2h+h2o                    1.050E+13    0.00    4565.0 !
20/10/04 a/2
phc2h+c2h=c6h4c2h+c2h2                  2.000E+13    0.00       0.0 !
phc2h+o=c6h5cco+h                       4.800E+09    1.00       0.0 !
(BBB)
phc2h+ch3=c6h4c2h+ch4                   1.670E+12    0.00   15057.0 !
MARINOV 1996

!********************************
!  c6h4c2h radical reactions
!********************************

c6h4c2h+c2h2=A1c2hAC                    1.900E+21   -2.93    8100.0 !
94WANG/FRENK 10bar 28/10/04
c6h4c2h+c2h2=A2-X                       5.100E+48  -10.53   28000.0 !
94WANG/FRENK 10bar 28/10/04
c6h4c2h+h=phc2h                         4.200E+11    0.48     -71.7 !
"OK"?

!********************************
!  c6h5CCO radical reactions
!********************************

c6h5cco+o2=phco+co2                     1.00E+12     0.00       0.0 !
(CCC)

!********************************
!  phchco phenylketene reactions
!********************************

phchco+oh=phch2+co2                     3.730E+12    0.00   -1010.0
phchco+h=phch2+co                       4.400E+12    0.00    1459.0
phchco+o=phhco+co                       3.200E+12    0.00    -437.0

!*********************************************************************
*************************
!*********************************************************************
*************************
!*************************** DIAROMATICS AND DISUBSTUTED AROMATICS
*****************************
!*********************************************************************
*************************
!*********************************************************************
*************************

!***************************
! Bibenzyl c14h14 formation
!***************************

phch2+phch2=c14h14                      2.510E+11    0.40       0.0 !
(EMD 92)

!***************************
! Naphtalene napht formation
!***************************

c5h5+c5h5=napht+h2                      1.000E+13    0.00    7000.0 !
Marinov96*RTI*10
!c5h5+c5h5=napht+h+h                     2.000E+13    0.00   4000.0 !
MARINOV 1996
c5h5+c5h5=napht+h+h                     5.000E+12    0.00    8000.0 !
```

```
A1c2h3AC=napht+h                        1.000E+10    0.00    4780.1 !

phch2+c3h3=c10h10                       1.000E+10    0.00       0.0 !
(ZZ)

!***************************
! Naphtalene napht reactions
!***************************

napht+h=c10h9                           5.000E+14    0.00    5000.0 !
SAUER 1970
napht=A2-X+h                            4.500E+15    0.00  107433.1 !
OK
napht+h=A2-X+h2                         2.500E+14    0.00   15999.0 !
OK
napht+oh=A2-X+h2o                       1.630E+08    1.42    1450.8
napht+ch3=A2-X+ch4                      2.000E+12    0.00   15060.0 !
anish 19/10/04
napht+o=A2O+h                           1.83E+13    0.00    4529.16 !
2.230E+13    0.00    14530.7 ! 28/10/04
napht+o=A2-X+oh                         2.000E+13    0.00   14704.0 !
21/10/04 Id c6h6
napht+o2=A2-X+ho2                       6.300E+13    0.00   60000.0 !
OK

!***********************************
! Naphtalenyl radical A2-X reactions
!***********************************

A2-X+ho2=A2O+oh                         5.000E+13    0.00     5999.0 !
OK
A2-X+o2=A2O+o                           4.090E+13    0.00    6468.9 !
OK
A2-X+oh=A2O+h                           3.000E+13    0.00       0.0 !
MARINOV 1996

!***********************************
! Naphtalenoxy radical A2O reactions
!***********************************
!A2oh=A2O+h                              1.01E+71    -15.920
124789.67 !

A2O+h=A2oh                              7.060E+14    0.00       0.0 !
25/10/04
A2O=>indenyl+co                        2.900E+10     0.00
36424.47 !   9.400E+12    0.00   43853.0 ! 25/10/04 Frank HighP 25th
Symp Comb

!***************************
! Naphtalenol A2oh reactions
!***************************

A2oh+oh=A2O+h2o                         9.002E+13    0.00       0.0 !
A2oh+h=A2O+h2                           1.150E+14    0.00   12399.6 !
OK
A2oh+h=napht+oh                         2.230E+13    0.00    7927.8 !
OK
A2oh+o=A2O+oh                           1.260E+13    0.00    2899.1 !
OK

!***********************************
! DihydroNaphtalene c10h10 reactions
!***********************************
```

```
c10h10+oh=c10h9+h2o                     5.000E+06    2.00       0.0 !
MARINOV 1996
c10h10+o=c10h9+oh                       7.000E+11    0.70    6000.0 !
MARINOV 1996
c10h10+h=c10h9+h2                       2.000E+05    2.50    2500.0 !
MARINOV 1996

c10h9+h=c10h10                          1.000E+14    0.00       0.0 !
(Marinov96/RTI)

!********************************
!  c6h4c2h3 radical reactions
!********************************

c6h4c2h3+c2h2=A1c2h3AC                  5.000E+12    0.00       0.0

!************************
! Indene indene formation
!************************
phch2+c2h2=indene+h                     3.200E+11    0.00    7000.0  !
(AAA)
c6h4c2h3+ch3=indene+h+h                 5.000E+13    0.00       0.0 !
(EEE)
ch3c6h4c2h3+oh=indene+h+h2o             1.260E+13    0.00    2583.0 !
MARINOV 1996
ch3c6h4c2h3+h=indene+h+h2               3.980E+02    3.44    3120.0 !
MARINOV 1996

!************************
! Indene indene reactions
!************************

indene+h=indenyl+h2                     4.380e+08    1.77    2999.5 !
18/10/04
indene+o=indenyl+oh                     1.810e+13    0.00    3080.8 !
1.810E+10 0.00 3080.78"OK"
indene+oh=indenyl+h2o                   6.860e+09    1.18    -446.9 !
18/10/04
indene+ho2=indenyl+h2o2                 1.990e+12    0.00   11658.7 !
1.990E+09 0.00 11658.70"OK"
indene+o2=indenyl+ho2                   2.000e+13    0.00   25000.0 !
2.000E+10 0.00 25000.00"OK"
indene+o2=indenoxy+oh                   1.000e+13    0.00   20712.2 !
1.000E+10 0.00 20712.24"OK"

!***********************************
! Indenyl radical indenyl reactions
!***********************************

indenyl+o=ASTYRYL+co                    1.000E+14    0.00       0.0 !
MARINOV 1996
indenyl+ho2=ASTYRYL+co+oh               1.000E+13    0.00       0.0 !
MARINOV 1996
indenyl+c5h5=phnthrn+h+h                1.000E+13    0.00    4000.0 !
MARINOV 1996
indenyl+co=>A2O                         9.500e+03    1.40   26555.9 !
OK
indenyl+h=indene                        1.000e+14    0.00       0.0
indenyl+o=BSTYRYL+co                    1.000e+14    0.00       0.0
indenyl+o=indenoxy                      1.000e+13    0.00       0.0
indenyl+ho2=indenoxy+oh                 1.500e+13    0.00       0.0 !
18/10/04

!*************************************
```

```
! Indenoxy radical indenoxy reactions
!*************************************

indenoxy=BSTYRYL+co                     2.510e+11    0.00   43900.6 !
OK

!*******************************
! c10h7ch3 1-methylnaphtalene reactions
!*******************************

c10h7ch3+o2=c10h7ch2+ho2                4.000E+14    0.00   41348.0 !
idem toluene Emdee et al. 1992 J. Phys. Chem. vol. 96 p. 2151

A2-X+ch3=c10h7ch3                       3.050E+52  -11.80   17660.0 !
Chang et al. 2000 Z. Phys. Chem. vol 214 p. 1533
A2-X+ch3=c10h7ch2+h                     1.700E+36   -5.91   34630.0 !
Chang et al. 2000 Z. Phys. Chem. vol 214 p. 1533

c10h7ch2+h=c10h7ch3                     1.000E+14    0.00       0.0 !
Marinov et al. 1996 Comb. Sci. Tech. vol. 116-117 p. 211

c10h7ch3+ho2=c10h7ch2+h2o2              4.000E+11    0.00   14077.4 !
Baulch et al. 1994 J. Phys. Chem. Ref. Data vol. 23 p. 847
!c10h7ch3+ho2=c10h7ch2+h2o2              1.020E+04    2.50   12340.5 !
Scott
c10h7ch3+o=c10h7ch2+oh                  5.000E+08    1.50    8000.0 !
Marinov et al. 1996 Comb. Sci. Tech. vol. 116-117 p. 211
c10h7ch3+oh=c10h7ch2+h2o                2.450E+13    0.00    2583.0 !
Marinov et al. 1996 Comb. Sci. Tech. vol. 116-117 p. 211
c10h7ch3+h=c10h7ch2+h2                  3.980E+02    3.44    3120.0 !
Marinov et al. 1996 Comb. Sci. Tech. vol. 116-117 p. 211
c10h7ch3+h=napht+ch3                    8.670E+13    0.00    8090.0 !
Mati et al. 2007 Comb. Sci. Tech. vol. 179 p. 1261
c10h7ch3+ch3=c10h7ch2+ch4               1.580E+12    0.00   11099.4 !
Colket and Seery 1994 Proc. Comb. Instit. 1994 vol. 25 p. 883
c10h7ch3+A2-X=c10h7ch2+napht            2.100E+12    0.00    4400.1 !
Emdee et al. 1992 J. Phys. Chem. vol. 96 p. 2151

!*****************************************
! c10h7ch2 1-methylnaphtyl radical reactions
!*****************************************

c10h7ch2+o=c10h7hco+h                   1.650E+14    0.00       0.0 !
Emdee et al. 1992 J. Phys. Chem. vol. 96 p. 2151
c10h7ch2+o2=c10h7hco+o+h                6.310E+12    0.00   42997.1 !
Brezinsky et al. 1984 Int. J. Chem. Kin. vol. 16 p. 1053
c10h7ch2+o=A2-X+ch2o                    6.300E+11    0.00       0.0 !
Mati et al. 2007 Comb. Sci. Tech. vol. 179 p. 1261
c10h7ch2+ho2= c10h7hco+oh+h             5.000E+14    0.00       0.0 !
Emdee et al. 1992 J. Phys. Chem. vol. 96 p. 2151
!c10h7ch2+ho2=A2-X+ch2o+oh               8.000E+13    0.00       0.0
!!c10h7ch2+ho2= c10h7hco+oh+h             1.667E+14    0.00       0.0
!!c10h7ch2+ho2=A2-X+ch2o+oh               1.666E+14    0.00       0.0
!!c10h7ch2+oh=>c10h7hco+h+h                6.060E+13    0.00       0.0
c10h7ch2+oh=c10h7ch2oh                  2.000E+13    0.00       0.0 !
Hippler et al. 1991 Symp. Int. Comb. Proc. vol. 23 p. 21

c10h7ch2+ch3=c10h7c2h5                  1.190E+13    0.00     220.6 !
Brand et al. 1990 J. Phys. Chem. vol. 94 p. 6305
rev/ 5.000E+15  0.00 77197.42/

!*******************************************
! c10h7ch2oh 1-Naphthalenemethanol reactions
!*******************************************
```

```
c10h7ch2oh+o2=c10h7hco+ho2+h           3.000E+14    0.00   41347.99
c10h7ch2oh+oh=c10h7hco+h2o+h           5.100E+09    1.00     874.35
c10h7ch2oh+h=c10h7hco+h2+h             1.260E+14    0.00    8401.05
c10h7ch2oh+h=napht+ch2oh               1.200E+13    0.00    5148.18


!**********************************************
! c10h7hco 1-Naphthalenecarboxaldehyde reactions
!**********************************************

c10h7hco=c10h7co+h                     3.980E+15    0.00   83699.33
c10h7hco+o2=c10h7co+ho2                6.030E+13    0.00   40657.27
c10h7hco+ho2=c10h7co+h2o2              3.010E+12    0.00   13073.61
c10h7hco+oh=c10h7co+h2o                7.830E+12    0.00       0.0
c10h7hco+h=c10h7co+h2                  9.200E+10    1.05    3274.38
c10h7hco+h=napht+hco                   1.200E+13    0.00    5148.18
c10h7hco+o=c10h7co+oh                  6.000E+12    0.00    1809.29
c10h7hco+ch3=c10h7co+ch4               7.826E-08    6.10    1967.29
c10h7hco+c10h7ch2=c10h7co+c10h7ch3     2.770E+03    2.81    5773.0
c10h7hco+A2-X=c10h7co+napht            7.010E+11    0.00    4400.10

c10h7co=co+A2-X                        3.980E+14    0.00   29397.71

!*********************************
! c10h7c2h5 1-ethylnaphtalene reactions
!*********************************

c10h7c2h5+oh=c10h7chch3+h2o            7.090E+06    1.90   -1159.0 !
idem phc2h5+oh=Bphc2h4
c10h7c2h5+h=c10h7chch3+h2              3.300E+07    2.00    5346.0 !
idem phc2h5+H=Bphc2h4
c10h7c2h5+o2=c10h7chch3+ho2            4.000E+13    0.00   38220.0 !
idem phc2h5+o2=Bphc2h4
c10h7c2h5+o=c10h7chch3+oh              5.490E+05    2.50    2140.0 !
idem phc2h5+O=Bphc2h4
c10h7c2h5+ch3=c10h7chch3+ch4           7.505E-01    3.46    4485.0 !
idem phc2h5+ch3=Bphc2h4
c10h7c2h5+A2-X=c10h7chch3+napht        7.505E-01    3.46    4485.0 !
idem phc2h5+ch3=Bphc2h4
c10h7c2h5+c10h7ch2=c10h7chch3+c10h7ch3 7.505E-01    3.46    4485.0 !
idem phc2h5+ch3=Bphc2h4

c10h7chch3=h+c10h7c2h3                 1.800E+13    0.00   48233.0 !
estimation selon Dean

c10h7c2h3+h=A2R5+h2+h                  1.260E+14    0.00    8401.05
c10h7c2h3+oh=A2R5+h2o+h                5.180E+09    1.00     874.35
c10h7c2h3+o2=A2R5+ho2+h                3.000E+14    0.00   41347.99

!A2R5+oh=>napht+hcco                    1.000e+13    0.00       0.00

!*********************************
!  c6h4c2h3 radical reactions
!*********************************

c10h7ch2+o2=c10h7ch2o2                 2.430E+39   -8.96    8620.0
!c10h7ch2o2=c10h7cho2h                  1.947E+10    1.00   34940.0 !
calculées selon les paramètres Exgas
c10h7ch2o2=c10h7cho2h                  1.290E+10    0.79   31810.0 !
idem phch2o2=phcho2h Canneaux et al J. Phys. CHem. A 2008

c10h7ch2o2+c10h7ch3=c10h7ch2o2h+c10h7ch2    3.240E+11    0.00
14900.0 ! idem c3h6+c10h7ch2o2
```

```
c10h7ch2o2+ch4=c10h7ch2o2h+ch3         1.120E+13    0.00   24640.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+c2h6=c10h7ch2o2h+c2h5       1.700E+13    0.00   20460.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+h2o2=c10h7ch2o2h+ho2        2.400E+12    0.00   10000.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+ho2=c10h7ch2o2h+o2          1.000E+11    0.00       0.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+h2=c10h7ch2o2h+h            3.010E+13    0.00   26030.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+ch2o=c10h7ch2o2h+hco        5.600E+12    0.00   13600.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+c2h4=c10h7ch2o2h+c2h3       1.130E+13    0.00   30430.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+c2h2=c10h7ch2o2h+c2h        1.130E+13    0.00   30430.0 !
idem c2h4+c10h7ch2o2
c10h7ch2o2+c6h6=c10h7ch2o2h+c6h5       1.130E+13    0.00   30430.0 !
idem c2h4+c10h7ch2o2
c10h7ch2o2+toluen=c10h7ch2o2h+phch2    3.240E+11    0.00   14900.0 !
idem c3h6+c10h7ch2o2
c10h7ch2o2+acrol=c10h7ch2o2h+c2h3co    2.800E+12    0.00   13600.0 !
Ribaucour
c10h7ch2o2+c3h6=c10h7ch2o2h+ac3h5      3.240E+11    0.00   14900.0 !
Ribaucour

c10h7ch2o2+ho2=c10h7ch2o+oh+o2              1.000E+11    0.00
0.0 !
c10h7ch2o2+ch3o2=c10h7ch2o+ch3o+o2          1.000E+11    0.00
0.0 !
c10h7ch2o2+c2h5o2=c10h7ch2o+c2h5o+o2        1.000E+11    0.00
0.0 !
c10h7ch2o2+nc3h7o2=c10h7ch2o+nc3h7o+o2      1.000E+11    0.00
0.0 !
c10h7ch2o2+c10h7ch2o2=c10h7ch2o+c10h7ch2o+o2 1.000E+11    0.00
0.0 !

c10h7ch2o2h=c10h7ch2o+oh               1.723E+20   -1.58   46050.0 !
c10h7cho2h=c10h7hco+oh                 3.000E+11    0.00   22000.0 !
Ribaucour

c10h7ch2o=c10h7hco+h                   1.300E+14    0.00    1100.0 !
idem phch2o=phhco+H

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
nc10h22+phch2=Ac10h21+toluen           7.940E+11    0.00   20500.0 !
nc10h22+phch2=Bc10h21+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !
nc10h22+phch2=Cc10h21+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !
nc10h22+phch2=Dc10h21+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !
nc10h22+phch2=Ec10h21+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !

c10h21qA+phch2=c10h21qjA+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
c10h21qB+phch2=c10h21qjB+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
c10h21qC+phch2=c10h21qjC+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
c10h21qD+phch2=c10h21qjD+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
c10h21qE+phch2=c10h21qjE+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o

nc10h22+c6h5=Ac10h21+c6h6              7.940E+11    0.00   20500.0 !
nc10h22+c6h5=Bc10h21+c6h6              7.940E+11    0.00   16200.0 !
nc10h22+c6h5=Cc10h21+c6h6              7.940E+11    0.00   16200.0 !
```

```
nc10h22+c6h5=Dc10h21+c6h6              7.940E+11    0.00   16200.0 !
nc10h22+c6h5=Ec10h21+c6h6              7.940E+11    0.00   16200.0 !

nc10h22+c10h7ch2=Ac10h21+c10h7ch3          7.50E+11   0.00  8000.0 !
Andrae
nc10h22+c10h7ch2=Bc10h21+c10h7ch3          5.0E+11    0.00   7000.0
! Andrae
nc10h22+c10h7ch2=Cc10h21+c10h7ch3          5.0E+11    0.00   7000.0
! Andrae
nc10h22+c10h7ch2=Dc10h21+c10h7ch3          5.0E+11    0.00   7000.0
! Andrae
nc10h22+c10h7ch2=Ec10h21+c10h7ch3          5.0E+11    0.00   7000.0
! Andrae

c10h7ch3+c10h21qjA=c10h7ch2+c10h21qA       3.0E+12    0.00
12000.0! Andrae
c10h7ch3+c10h21qjB=c10h7ch2+c10h21qB       3.0E+12    0.00
12000.0! Andrae
c10h7ch3+c10h21qjC=c10h7ch2+c10h21qC       3.0E+12    0.00
12000.0! Andrae
c10h7ch3+c10h21qjD=c10h7ch2+c10h21qD       3.0E+12    0.00
12000.0! Andrae
c10h7ch3+c10h21qjE=c10h7ch2+c10h21qE       3.0E+12    0.00
12000.0! Andrae

c10h7ch2+c10h21qjA=c10h7ch2o+c10h21ojA      3.0E+12    0.00
12000.0!Andrae
c10h7ch2+c10h21qjB=c10h7ch2o+c10h21ojB      3.0E+12    0.00
12000.0!Andrae
c10h7ch2+c10h21qjC=c10h7ch2o+c10h21ojC      3.0E+12    0.00
12000.0!Andrae
c10h7ch2+c10h21qjD=c10h7ch2o+c10h21ojD      3.0E+12    0.00
12000.0!Andrae
c10h7ch2+c10h21qjE=c10h7ch2o+c10h21ojE      3.0E+12    0.00
12000.0!Andrae

c10h7hco+c10h21qjA=c10h7co+c10h21qA    3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+c10h21qjB=c10h7co+c10h21qB    3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+c10h21qjC=c10h7co+c10h21qC    3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+c10h21qjD=c10h7co+c10h21qD    3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+c10h21qjE=c10h7co+c10h21qE    3.00E+12 0.0 17000.0

!A2oh+ho2=A2O+h2o2                     6.800E+13    0.00   10000.0  !
ESTIMEE inspiree =c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2

!napht+ho2=>A2-X+h2o2                   .8620E+06  2.0  20572.64 !
5.400E+04    2.50   0.0 ! Scott Walker C&F 2002 =c6h6+ho2
!A2-X+h2o2=> napht+ho2                 .6831E+04   2.0   -377.36 !

!phc2h+ho2=c6h4c2h+h2o2                5.400E+04    2.50   27620.0 !
Scott Walker C&F 2002 =c6h6+ho2

!c10h7ch2+ho2=A2-X+ch2o+oh           8.000E+13    0.00       0.0 !
!phch2oh+ho2=phch2o+h2o2              3.000E+13    0.00   15000.0 ! c
=c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2
!c10h7ch2+ho2=A2-X+ch2o+oh            1.666E+14    0.00       0.0 !


!c10h7ch2oh+ho2=>c10h7ch2o+h2o2       6.800E+13    0.00   10000.0 ! c
=c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2
!c10h7c2h5+ho2=c10h7chch3+h2o2         6.800E+03    2.50   10115.0 !
Scott 2002=phc2h5+ho2=>Bphc2h4+h2o2

c10h7c2h3+ho2=>A2R5+h2o2+h                 6.800E+03    2.50
```

```
10115.0 ! Scott 2002=phc2h5+ho2=>Bphc2h4+h2o2
c10h7c2h3+ho2 =>c10h7ch2+hco+oh               2.500E+12    1.00
25000.0 ! THESE GAELLE*3= styren+ho2
c10h7c2h3+ho2 =>c10h7hco+ch2+oh               2.500E+12    1.00
25000.0 ! THESE GAELLE*3

c10h7hco+Ac10h21=c10h7co+nc10h22        3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+Bc10h21=c10h7co+nc10h22        3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+Cc10h21=c10h7co+nc10h22        3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+Dc10h21=c10h7co+nc10h22        3.00E+12 0.0 17000.0
c10h7hco+Ec10h21=c10h7co+nc10h22        3.00E+12 0.0 17000.0

phch2+c10h21qjA=phch2o+c10h21ojA       3.0E+12    0.00   12000.0
phch2+c10h21qjB=phch2o+c10h21ojB       3.0E+12    0.00   12000.0
phch2+c10h21qjC=phch2o+c10h21ojC       3.0E+12    0.00   12000.0
phch2+c10h21qjD=phch2o+c10h21ojD       3.0E+12    0.00   12000.0
phch2+c10h21qjE=phch2o+c10h21ojE       3.0E+12    0.00   12000.0

c6h5+c10h21qjA=c6h5o+c10h21ojA       3.0E+12    0.00   12000.0
c6h5+c10h21qjB=c6h5o+c10h21ojB       3.0E+12    0.00   12000.0
c6h5+c10h21qjC=c6h5o+c10h21ojC       3.0E+12    0.00   12000.0
c6h5+c10h21qjD=c6h5o+c10h21ojD       3.0E+12    0.00   12000.0
c6h5+c10h21qjE=c6h5o+c10h21ojE       3.0E+12    0.00   12000.0

indenyl+c10h21qjA=indenoxy+c10h21ojA       7.50E+11   0.00  9000.0 !
Andrae
indenyl+c10h21qjB=indenoxy+c10h21ojB       5.0E+11    0.00   7000.0 !
Andrae
indenyl+c10h21qjC=indenoxy+c10h21ojC       5.0E+11    0.00   7000.0 !
Andrae
indenyl+c10h21qjD=indenoxy+c10h21ojD       5.0E+11    0.00   7000.0 !
Andrae
indenyl+c10h21qjE=indenoxy+c10h21ojE       5.0E+11    0.00   7000.0 !
Andrae


A2-X+c10h21qjA=A2O+c10h21ojA       4.0E+12    0.00   14000.0
A2-X+c10h21qjB=A2O+c10h21ojB       3.0E+12    0.00   12000.0
A2-X+c10h21qjC=A2O+c10h21ojC       3.0E+12    0.00   12000.0
A2-X+c10h21qjD=A2O+c10h21ojD       3.0E+12    0.00   12000.0
A2-X+c10h21qjE=A2O+c10h21ojE       3.0E+12    0.00   12000.0

A2-X+nc10h22=Ac10h21+napht           7.940E+11    0.00   20500.0 !
A2-X+nc10h22=Bc10h21+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !
A2-X+nc10h22=Cc10h21+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !
A2-X+nc10h22=Dc10h21+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !
A2-X+nc10h22=Ec10h21+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !

!nc9h20+c10h7ch2=Ac9h19+c10h7ch3           7.50E+11    0.00   8000.0
!
!nc9h20+c10h7ch2=Bc9h19+c10h7ch3           5.0E+11    0.00   7000.0 !
!nc9h20+c10h7ch2=Cc9h19+c10h7ch3           5.0E+11    0.00   7000.0 !
!nc9h20+c10h7ch2=Dc9h19+c10h7ch3           5.0E+11    0.00   7000.0 !
!nc9h20+c10h7ch2=Ec9h19+c10h7ch3           2.50E+11   0.00   7000.0

!c10h7ch3+c9h19qjA=c10h7ch2+c9h19qA        3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch3+c9h19qjB=c10h7ch2+c9h19qB        3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch3+c9h19qjC=c10h7ch2+c9h19qC        3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch3+c9h19qjD=c10h7ch2+c9h19qD        3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch3+c9h19qjE=c10h7ch2+c9h19qE        3.0E+12    0.00   12000.0

!c10h7ch2+c9h19qjA=c10h7ch2o+c9h19ojA       3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch2+c9h19qjB=c10h7ch2o+c9h19ojB       3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch2+c9h19qjC=c10h7ch2o+c9h19ojC       3.0E+12    0.00   12000.0
```

```
!c10h7ch2+c9h19qjD=c10h7ch2o+c9h19ojD       3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch2+c9h19qjE=c10h7ch2o+c9h19ojE       3.0E+12    0.00   12000.0

!A2O+nc9h20=Ac9h19+A2oh           6.000E-01    4.00    8200.0  ! mE
2957 CN
!A2O+nc9h20=Bc9h19+A2oh           3.000E+02    3.00    7650.0 !
(c2h5oh*2 marinov 20/07/2000)
!A2O+nc9h20=Cc9h19+A2oh           3.000E+02    3.00    7650.0 !
(c2h5oh*2 marinov 20/07/2000)
!A2O+nc9h20=Dc9h19+A2oh           3.000E+02    3.00    7650.0 !
(c2h5oh*2 marinov 20/07/2000)
!A2O+nc9h20=Ec9h19+A2oh           2.000E+02    3.00    7650.0 !
(c2h5oh*2 marinov 20/07/2000)

!A2-X+nc9h20=Ac9h19+napht           7.940E+11    0.00   20500.0 !
7.50E+11    0.00   8000.0
!A2-X+nc9h20=Bc9h19+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !
5.0E+11    0.00   7000.0
!A2-X+nc9h20=Cc9h19+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !
5.0E+11    0.00   7000.0
!A2-X+nc9h20=Dc9h19+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !
5.0E+11    0.00   7000.0
!A2-X+nc9h20=Ec9h19+napht           7.940E+11    0.00   16200.0 !
5.0E+11    0.00   7000.0

!nc7h16+c10h7ch2=Ac7h15+c10h7ch3           7.50E+11    0.00   8000.0
!
!nc7h16+c10h7ch2=Bc7h15+c10h7ch3           5.0E+11    0.00   7000.0 !
!nc7h16+c10h7ch2=Cc7h15+c10h7ch3           5.0E+11    0.00   7000.0 !
!nc7h16+c10h7ch2=Dc7h15+c10h7ch3           2.50E+11    0.00   7000.0
!

!c10h7ch3+c7h15qjA=c10h7ch2+c7h15qA        3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch3+c7h15qjB=c10h7ch2+c7h15qB        3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch3+c7h15qjC=c10h7ch2+c7h15qC        3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch3+c7h15qjD=c10h7ch2+c7h15qD        3.0E+12    0.00   12000.0

!c10h7ch2+c7h15qjA=c10h7ch2o+c7h15ojA       3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch2+c7h15qjB=c10h7ch2o+c7h15ojB       3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch2+c7h15qjC=c10h7ch2o+c7h15ojC       3.0E+12    0.00   12000.0
!c10h7ch2+c7h15qjD=c10h7ch2o+c7h15ojD       3.0E+12    0.00   12000.0

!nc9h20+phch2=Ac9h19+toluen           7.940E+11    0.00   20500.0 !
!nc9h20+phch2=Bc9h19+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !
!nc9h20+phch2=Cc9h19+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !
!nc9h20+phch2=Dc9h19+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !
!nc9h20+phch2=Ec9h19+toluen           7.940E+11    0.00   16200.0 !

!c9h19qA+phch2=c9h19qjA+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
!c9h19qB+phch2=c9h19qjB+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
!c9h19qC+phch2=c9h19qjC+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
!c9h19qD+phch2=c9h19qjD+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o
!c9h19qE+phch2=c9h19qjE+toluen        1.050E+11    0.00    9500.0 !
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o


indenyl+nc10h22=indene+Ac10h21       4.610E+11    0.00    6500.0 !
(20/07/2000) 6.000E+11    0.00   13500.0  ! mE 2992 CR!5.50E+11
0.00    6500.0 ! 6.000E-01    4.00    8200.0  ! mE 2957 CN
indenyl+nc10h22=indene+Bc10h21       3.110E+11    0.00    5500.0 !
```

```
(20/07/2000)!4.000E+11    0.00   11000.0 !3.110E+11    0.00    5500.0
!(20/07/2000) ! 4.000E+11    0.00    9600.0  ! mE 2958 CN
indenyl+nc10h22=indene+Cc10h21       3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)! 4.000E+11    0.00   11000.0 !3.110E+11    0.00
5500.0 !(20/07/2000)! 4.000E+11    0.00    9600.0  ! mE 2958 CN
indenyl+nc10h22=indene+Dc10h21       3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)!4.000E+11    0.00   11000.0 !3.110E+11    0.00    5500.0
!(20/07/2000)! 4.000E+11    0.00    9600.0  ! mE 2958 CN
indenyl+nc10h22=indene+Ec10h21       3.110E+11    0.00    5500.0 !
(20/07/2000)!4.000E+11    0.00   11000.0 !3.110E+11    0.00    5500.0
!(20/07/2000)! 4.000E+11    0.00    9600.0  ! mE 2958 CN

!indenyl+nc9h20=indene+Ac9h19          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc9h20=indene+Bc9h19          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc9h20=indene+Cc9h19          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc9h20=indene+Dc9h19          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc9h20=indene+Ec9h19          1.000e+14    0.00       0.0

!indenyl+nc8h18=indene+Ac8h17          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc8h18=indene+Bc8h17          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc8h18=indene+Cc8h17          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc8h18=indene+Dc8h17          1.000e+14    0.00       0.0

!indenyl+nc7h16=indene+Ac7h15          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc7h16=indene+Bc7h15          1.000e+14    0.00       0.0
!indenyl+nc7h16=indene+Cc7h15          1.000e+14    0.00       0.0

!c10h7ch2o2+nc10h22=c10h7ch2o2h+Ac10h21    3.240E+11    0.00
14900.0 ! idem c3h6+c10h7ch2o2
!c10h7ch2o2+nc10h22=c10h7ch2o2h+Bc10h21    3.240E+11    0.00
14900.0 ! idem c3h6+c10h7ch2o2
!c10h7ch2o2+nc10h22=c10h7ch2o2h+Cc10h21    3.240E+11    0.00
14900.0 ! idem c3h6+c10h7ch2o2
!c10h7ch2o2+nc10h22=c10h7ch2o2h+Dc10h21    3.240E+11    0.00
14900.0 ! idem c3h6+c10h7ch2o2
!c10h7ch2o2+nc10h22=c10h7ch2o2h+Ec10h21    3.240E+11    0.00
14900.0 ! idem c3h6+c10h7ch2o2

!BSTYRYL+Ac10h21=phc2h+nc10h22                1.000E+13    0.00
0.0 !
!BSTYRYL+Bc10h21=phc2h+nc10h22                1.000E+13    0.00
0.0 !
!BSTYRYL+Cc10h21=phc2h+nc10h22                1.000E+13    0.00
0.0 !
!BSTYRYL+Dc10h21=phc2h+nc10h22                1.000E+13    0.00
0.0 !
!BSTYRYL+Ec10h21=phc2h+nc10h22                1.000E+13    0.00
0.0 !

ASTYRYL+Ac10h21=phc2h+nc10h22                3.00E+12 0.0 13000.0 !
ASTYRYL+Bc10h21=phc2h+nc10h22                3.00E+12 0.0 13000.0 !
ASTYRYL+Cc10h21=phc2h+nc10h22                3.00E+12 0.0 13000.0 !
ASTYRYL+Dc10h21=phc2h+nc10h22                3.00E+12 0.0 13000.0 !
ASTYRYL+Ec10h21=phc2h+nc10h22                3.00E+12 0.0 13000.0 !

!c10h21ojA+c10h7co=> Ac10h21+A2-X+co2        3.980E+14    0.00
24397.71
!c10h21ojB+c10h7co=> Bc10h21+A2-X+co2        3.980E+14    0.00
24397.71
!c10h21ojC+c10h7co=> Cc10h21+A2-X+co2        3.980E+14    0.00
24397.71
!c10h21ojD+c10h7co=> Dc10h21+A2-X+co2        3.980E+14    0.00
24397.71
!c10h21ojE+c10h7co=> Ec10h21+A2-X+co2        3.980E+14    0.00
```

```
24397.71

!$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$
$$$$$$
!$$$$$$$$$$$$    methyl octanoate mechanism
$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$
!$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$$
$$$$$$
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!Methyloctanoate!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
mo=mo8j+h                      7.900e+15   0.0   9.797e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mo7j+h                      5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mo6j+h                      5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mo5j+h                      5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mo4j+h                      5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mo3j+h                      5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo2j+h=mo                      1.000e+14   0.0   0.0         !1  rnc7
*: h +fragm
mo=momj+h                      7.900e+15   0.0   9.397e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608 (-4kcal prox O)
mo=mhp7j+ch3                   5.000e+16   0.0   8.466e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mhx6j+c2h5                  7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mpe5j+nc3h7                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mb4j+pc4h9                  7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=mp3j+Ac5h11                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=me2j+Ac6h13                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mo=ch3co2+Ac7h15               1.130e+16   0.0   7.770e+04   !
asCH3COCH3 Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311 (-4kcal
prox O)
c7h15co+ch3o=mo                1.500e+13   0.0   0.0         !asDMC
Glaude et al., Proc.Combust.Inst. 31 (2005) 1111-1118
mo=oaoj+ch3                    3.160e+16   0.0   8.307e+04   !asDME
Batt et al., Proc. Combust. Inst. 19 (1982) 81-87
!!!!!!
mo+o2=mo8j+ho2                 2.000e+13   0.0   5.087e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mo+o2=mo7j+ho2                 4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mo+o2=mo6j+ho2                 4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mo+o2=mo5j+ho2                 4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mo+o2=mo4j+ho2                 4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mo+o2=mo3j+ho2                 4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
!mo+o2=mo2j+ho2                2.000e+13   0.0   4.520e+04   !DHr
Ingham
!mo+o2=mo2j+ho2                4.000e+13   0.0   4.130e+04   !2  rnc7,
tertiary
```

```
mo+o2=mo2j+ho2                 4.000e+13   0.0   3.800e+04   !
!mo+o2=momj+ho2                2.000e+13   0.0   5.087e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mo+o2=momj+ho2                 2.050e+13   0.0   4.491e+04   !Dayma et
al., Proc. Combust. Inst.
!!!!!!
mo+h=mo8j+h2                   9.400e+04   2.75  6.280e+03   !2  anc7,
primary f
mo+h=mo7j+h2                   1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mo+h=mo6j+h2                   1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mo+h=mo5j+h2                   1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mo+h=mo4j+h2                   1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mo+h=mo3j+h2                   1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mo+h=mo2j+h2                   5.400e+04   2.5  -1.900e+03   !
mo+h=momj+h2                   1.440e+13   0.0   6.095e+03   !(HELD
94)
mo+o=mo8j+oh                   9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mo+o=mo7j+oh                   4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mo+o=mo6j+oh                   4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mo+o=mo5j+oh                   4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mo+o=mo4j+oh                   4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mo+o=mo3j+oh                   4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mo+o=mo2j+oh                   8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
mo+o=momj+oh                   9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mo+oh=mo8j+h2o                 5.250e+09   0.97  1.590e+03   !2  rnc7,
primary;
mo+oh=mo7j+h2o                 4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mo+oh=mo6j+h2o                 4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mo+oh=mo5j+h2o                 4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mo+oh=mo4j+h2o                 4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mo+oh=mo3j+h2o                 4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mo+oh=mo2j+h2o                 3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
mo+oh=momj+h2o                 7.100e+06   1.80 -5.960e+02   !(HELD
98)
mo+ho2=mo8j+h2o2               8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2  anc7,
primary f
mo+ho2=mo7j+h2o2               5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mo+ho2=mo6j+h2o2               5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mo+ho2=mo5j+h2o2               5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mo+ho2=mo4j+h2o2               5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mo+ho2=mo3j+h2o2               5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mo+ho2=mo2j+h2o2               6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
```

```
mo+ho2=momj+h2o2              9.640e+10   0.00  1.258e+04   !(TSANG
87)
mo+hco=mo8j+ch2o              1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mo+hco=mo7j+ch2o              1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mo+hco=mo6j+ch2o              1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mo+hco=mo5j+ch2o              1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mo+hco=mo4j+ch2o              1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mo+hco=mo3j+ch2o              1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mo+hco=mo2j+ch2o              1.140e+09   1.30  1.550e+04   !ST
mo+hco=momj+ch2o              1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mo+ch3=mo8j+ch4               4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mo+ch3=mo7j+ch4               2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3=mo6j+ch4               2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3=mo5j+ch4               2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3=mo4j+ch4               2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3=mo3j+ch4               2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3=mo2j+ch4               1.000e+11   0.00  7.300e+03   !
mo+ch3=momj+ch4               4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mo+ch3o=mo8j+ch3oh            1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mo+ch3o=mo7j+ch3oh            1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3o=mo6j+ch3oh            1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3o=mo5j+ch3oh            1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3o=mo4j+ch3oh            1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3o=mo3j+ch3oh            1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch3o=mo2j+ch3oh            1.780e+12   0.00  1.200e+03   !
mo+ch3o=momj+ch3oh            1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mo+ch2oh=mo8j+ch3oh           1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mo+ch2oh=mo7j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch2oh=mo6j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch2oh=mo5j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch2oh=mo4j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch2oh=mo3j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mo+ch2oh=mo2j+ch3oh           3.600e+01   2.95  1.000e+04   !
mo+ch2oh=momj+ch3oh           1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mo+ch3o2=mo8j+ch3o2h          8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=mo7j+ch3o2h          5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=mo6j+ch3o2h          5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=mo5j+ch3o2h          5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=mo4j+ch3o2h          5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=mo3j+ch3o2h          5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=mo2j+ch3o2h          5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=momj+ch3o2h          5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mo+ch3o2=mo8j+mo3ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo7j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo6j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo5j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo4j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo3j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo2j+mo3ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+ch3o2=momj+mo3ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo8j+mo2ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo7j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo6j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo5j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo4j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo3j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo2j+mo2ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+ch3o2=momj+mo2ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo8j+momooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo7j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo6j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo5j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo4j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo3j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo2j+momooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+ch3o2=momj+momooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+ch3o2=mo8j+mo8ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+ch3o2=momj+mo8ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo7oo=mo8j+mo7ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo7oo=mo7j+mo7ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo7oo=mo6j+mo7ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo7oo=mo5j+mo7ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo7oo=mo4j+mo7ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo7oo=mo3j+mo7ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo7oo=mo2j+mo7ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+mo7oo=momj+mo7ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo6oo=mo8j+mo6ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo6oo=mo7j+mo6ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo6oo=mo6j+mo6ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo6oo=mo5j+mo6ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo6oo=mo4j+mo6ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo6oo=mo3j+mo6ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo6oo=mo2j+mo6ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+mo6oo=momj+mo6ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo5oo=mo8j+mo5ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo5oo=mo7j+mo5ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo5oo=mo6j+mo5ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo5oo=mo5j+mo5ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo5oo=mo4j+mo5ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo5oo=mo3j+mo5ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo5oo=mo2j+mo5ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+mo5oo=momj+mo5ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo4oo=mo8j+mo4ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo4oo=mo7j+mo4ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo4oo=mo6j+mo4ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo4oo=mo5j+mo4ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo4oo=mo4j+mo4ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo4oo=mo3j+mo4ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo4oo=mo2j+mo4ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+mo4oo=momj+mo4ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo3oo=mo8j+mo3ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo3oo=mo7j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo3oo=mo6j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo3oo=mo5j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo3oo=mo4j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo3oo=mo3j+mo3ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo3oo=mo2j+mo3ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+mo3oo=momj+mo3ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo2oo=mo8j+mo2ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo2oo=mo7j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo2oo=mo6j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo2oo=mo5j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo2oo=mo4j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo2oo=mo3j+mo2ooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+mo2oo=mo2j+mo2ooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+mo2oo=momj+mo2ooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+momoo=mo8j+momooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mo+momoo=mo7j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+momoo=mo6j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+momoo=mo5j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+momoo=mo4j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+momoo=mo3j+momooh          1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mo+momoo=mo2j+momooh          1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mo+momoo=momj+momooh          2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!!!!!!
!mo8j+o2=mo8oo                9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!mo7j+o2=mo7oo                1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!mo6j+o2=mo6oo                1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!mo5j+o2=mo5oo                1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!mo4j+o2=mo4oo                1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!mo3j+o2=mo3oo                1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
!mo2j+o2=mo2oo                1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!momj+o2=momoo                4.500e+12   0.00        0.0   !10  nc7;
primary
!momj+o2=momoo                3.500E+11   0.0     -1700.0   !Dagaut
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001) 61-84
mo8ooh7j+o2=mo8ooh7oo         1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
```

```
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo8ooh6j+o2=mo8ooh6oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo8ooh5j+o2=mo8ooh5oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo8ooh4j+o2=mo8ooh4oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo7ooh8j+o2=mo7ooh8oo          1.500e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
mo7ooh6j+o2=mo7ooh6oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo7ooh5j+o2=mo7ooh5oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo7ooh4j+o2=mo7ooh4oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo7ooh3j+o2=mo7ooh3oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo6ooh8j+o2=mo6ooh8oo          9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mo6ooh5j+o2=mo6ooh5oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo6ooh7j+o2=mo6ooh7oo          9.500e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
mo6ooh4j+o2=mo6ooh4oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo6ooh3j+o2=mo6ooh3oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo6ooh2j+o2=mo6ooh2oo          1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mo5ooh8j+o2=mo5ooh8oo          9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mo5ooh7j+o2=mo5ooh7oo          1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
mo5ooh6j+o2=mo5ooh6oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo5ooh4j+o2=mo5ooh4oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo5ooh3j+o2=mo5ooh3oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo5ooh2j+o2=mo5ooh2oo          1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mo4ooh8j+o2=mo4ooh8oo          9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mo4ooh7j+o2=mo4ooh7oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo4ooh6j+o2=mo4ooh6oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo4ooh5j+o2=mo4ooh5oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo4ooh3j+o2=mo4ooh3oo          3.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2kt)
mo4ooh2j+o2=mo4ooh2oo          1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mo3ooh7j+o2=mo3ooh7oo          1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
mo3ooh6j+o2=mo3ooh6oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo3ooh5j+o2=mo3ooh5oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo3ooh4j+o2=mo3ooh4oo          1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mo3ooh2j+o2=mo3ooh2oo          1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mo2ooh6j+o2=mo2ooh6oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo2ooh5j+o2=mo2ooh5oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo2ooh4j+o2=mo2ooh4oo          1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
```

```
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mo2ooh3j+o2=mo2ooh3oo          1.000e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kq)
mo2oohmj+o2=mo2oohmoo          3.500E+11   0.0     -1700.0   !Dagaut
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001) 61-84
momooh2j+o2=momooh2oo          1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!!!!!!
mo8j=mo5j                      9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo8j=mo4j                      1.700e+07   1.00  1.200e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo8j=mo3j                      2.900e+06   1.00  1.740e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo7j=>mo4j                     9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo7j=>mo3j                     1.700e+07   1.00  1.200e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo6j=>mo3j                     9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo4j=>mo7j                     9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo3j=>mo7j                     1.700e+07   1.00  1.200e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo3j=>mo6j                     9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo3j=momj                      2.500e+07   1.00  1.450e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mo2j=mo7j                      2.900e+06   1.00  1.740e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo2j=mo6j                      1.700e+07   1.00  1.200e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo2j=mo5j                      9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo2j=momj                      1.500e+08   1.00  2.280e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 3Hp)+3kcal
momj=mo4j                      2.900e+07   1.00  1.740e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo8oo=mo8ooh7j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo8oo=mo8ooh6j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo8oo=mo8ooh5j                 1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo8oo=mo8ooh4j                 1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mo7oo=mo7ooh8j                 4.950e+09   1.00  3.550e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 3Hp)
mo7oo=mo7ooh6j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo7oo=mo7ooh5j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo7oo=mo7ooh4j                 1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo7oo=mo7ooh3j                 1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mo6oo=mo6ooh8j                 8.550e+08   1.00  2.800e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mo6oo=mo6ooh7j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo6oo=mo6ooh5j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo6oo=mo6ooh4j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo6oo=mo6ooh3j                 1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
```

```
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
!mo6oo=mo6ooh2j                1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mo6oo=mo6ooh2j                 1.720e+07   1.00  1.600e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Ht)-2kcal
mo5oo=mo5ooh8j                 1.500e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)
mo5oo=mo5ooh7j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo5oo=mo5ooh6j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo5oo=mo5ooh4j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo5oo=mo5ooh3j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mo5oo=mo5ooh2j                1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
!mo5oo=mo5ooh2j                1.000e+08   1.00  1.950e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs ally)
mo5oo=mo5ooh2j                 1.000e+08   1.00  1.700e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)-2kcal
mo4oo=mo4ooh8j                 1.720e+07   1.00  2.400e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 3Hp)
mo4oo=mo4ooh7j                 1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo4oo=mo4ooh6j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo4oo=mo4ooh5j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mo4oo=mo4ooh3j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mo4oo=mo4ooh2j                5.700e+08   1.00  2.550e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mo4oo=mo4ooh2j                5.700e+08   1.00  2.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs ally)
mo4oo=mo4ooh2j                 5.700e+08   1.00  1.800e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Ht)-2kcal
mo3oo=mo3ooh7j                 1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mo3oo=mo3ooh6j                 1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo3oo=mo3ooh5j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo3oo=mo3ooh4j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mo3oo=mo3ooh2j                3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mo3oo=mo3ooh2j                3.300e+09   1.00  3.000e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs ally)
mo3oo=mo3ooh2j                 3.300e+09   1.00  2.750e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Ht)-2kcal
!mo3oo=mo3ooh2j                2.837e+12   0.00  2.779e+04   !12
paper rs values
mo2oo=mo2ooh6j                 1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mo2oo=mo2ooh5j                 1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mo2oo=mo2ooh4j                 5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mo2oo=mo2ooh3j                 3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mo2oo=mo2ooh3j                1.088e+12   0.00  2.921e+04   !12
paper rs values
mo2oo=mo2oohmj                 1.500e+08   1.00  2.850e+04   !Buda et
```

```
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+3.5poster
ECM
momoo=momooh2j                 1.000e+08   1.00  2.170e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+2.7poster
ECM
mo8ooh7oo=>mo7ooh8oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo7ooh8oo=>mo8ooh7oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo7ooh6oo=>mo6ooh7oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo6ooh7oo=>mo7ooh6oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo6ooh5oo=>mo5ooh6oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo5ooh6oo=>mo6ooh5oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo5ooh4oo=>mo4ooh5oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo4ooh5oo=>mo5ooh4oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo4ooh3oo=>mo3ooh4oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo3ooh4oo=>mo4ooh3oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo3ooh2oo=>mo2ooh3oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mo2ooh3oo=>mo3ooh2oo           7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!!!!!!
mo8j=c2h4+mhx6j                2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mo7j=c3h6+mpe5j                2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mo6j=c4h8+mb4j                 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mo6j=ch3+mhp6d                 2.000e+13   0.00  3.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo5j=c5h10+mp3j                2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mo5j=c2h5+mhx5d                2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mo4j=c6h12-1+me2j              2.000e+13   0.00  2.470e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (-4kcal)
mo4j=nc3h7+mpe4d               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mo3j=c7h14-1+ch3co2            2.000e+13   0.00  3.050e+04   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (-4kcal)
mo3j=pc4h9+mb3d                2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mo2j=Ac5h11+mp2d               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
c7h14co+ch3o=mo2j              5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
momj=ch2o+c7h15co              1.640e+22  -2.33  3.195e+04   !Dooley
et al., Combust. Flame, 153 (2008) 2-32
co2+Ac7h15=oaoj                1.000e+11   0.00  3.936e+04   !3  since
reaction
mo8j=h+mo7d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo7j=h+mo7d                    3.000e+13   0.00  3.900e+04   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (3Hp)
mo7j=h+mo6d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
```

```
mo6j=h+mo6d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo6j=h+mo5d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo5j=h+mo5d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo5j=h+mo4d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo4j=h+mo4d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo4j=h+mo3d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo3j=h+mo3d                    3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mo3j=h+mo2d                    3.200e+13   0.00  3.480e+04   !Touchard
(2005) Th?se INPL (2Hs ally)
mo2j=h+mo2d                    3.000e+13   0.00  5.050e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
!!!!!!
mo8j+o2=mo7d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo7j+o2=mo7d+ho2               8.070e+11   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo7j+o2=mo6d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo6j+o2=mo6d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo6j+o2=mo5d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo5j+o2=mo5d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo5j+o2=mo4d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo4j+o2=mo4d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo4j+o2=mo3d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo3j+o2=mo3d+ho2               1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mo3j+o2=mo2d+ho2               2.600e+11   0.00  2.500e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
mo2j+o2=mo2d+ho2               1.580e+12   0.00  1.520e+04   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
!!!!!!
mo8oo+mo8oo=>mo8o+mo8o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+mo7oo=>mo8o+mo7o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+mo6oo=>mo8o+mo6o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+mo5oo=>mo8o+mo5o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+mo4oo=>mo8o+mo4o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+mo3oo=>mo8o+mo3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+mo2oo=>mo8o+mo2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+momoo=>mo8o+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo7oo+mo7oo=>mo7o+mo7o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo7oo+mo6oo=>mo7o+mo6o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo7oo+mo5oo=>mo7o+mo5o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo7oo+mo4oo=>mo7o+mo4o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo7oo+mo3oo=>mo7o+mo3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo7oo+mo2oo=>mo7o+mo2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo7oo+momoo=>mo7o+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo6oo+mo6oo=>mo6o+mo6o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo6oo+mo5oo=>mo6o+mo5o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo6oo+mo4oo=>mo6o+mo4o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo6oo+mo3oo=>mo6o+mo3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo6oo+mo2oo=>mo6o+mo2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo6oo+momoo=>mo6o+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo5oo+mo5oo=>mo5o+mo5o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo5oo+mo4oo=>mo5o+mo4o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo5oo+mo3oo=>mo5o+mo3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo5oo+mo2oo=>mo5o+mo2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo5oo+momoo=>mo5o+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo4oo+mo4oo=>mo4o+mo4o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo4oo+mo3oo=>mo4o+mo3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo4oo+mo2oo=>mo4o+mo2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo4oo+momoo=>mo4o+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo3oo+mo3oo=>mo3o+mo3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo3oo+mo2oo=>mo3o+mo2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo3oo+momoo=>mo3o+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo2oo+mo2oo=>mo2o+mo2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo2oo+momoo=>mo2o+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
momoo+momoo=>momo+momo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mo8oo+ch3o2=>mo8o+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mo7oo+ch3o2=>mo7o+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mo6oo+ch3o2=>mo6o+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mo5oo+ch3o2=>mo5o+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mo4oo+ch3o2=>mo4o+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mo3oo+ch3o2=>mo3o+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mo2oo+ch3o2=>mo2o+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
momoo+ch3o2=>momo+ch3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!!!!!!
mo8oo+ho2=mo8ooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mo7oo+ho2=mo7ooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mo6oo+ho2=mo6ooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mo5oo+ho2=mo5ooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mo4oo+ho2=mo4ooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mo3oo+ho2=mo3ooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mo2oo+ho2=mo2ooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
momoo+ho2=momooh+o2            2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mo8oo+h2o2=>mo8ooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo8ooh+ho2=>mo8oo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo7oo+h2o2=>mo7ooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo7ooh+ho2=>mo7oo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo6oo+h2o2=>mo6ooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo6ooh+ho2=>mo6oo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo5oo+h2o2=>mo5ooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo5ooh+ho2=>mo5oo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo4oo+h2o2=>mo4ooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo4ooh+ho2=>mo4oo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo3oo+h2o2=>mo3ooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo3ooh+ho2=>mo3oo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo2oo+h2o2=>mo2ooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mo2ooh+ho2=>mo2oo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
momoo+h2o2=>momooh+ho2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
momooh+ho2=>momoo+h2o2         2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!!!!!!
mo8oo+mo8j=mo8o+mo8o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+mo7j=mo8o+mo7o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+mo6j=mo8o+mo6o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+mo5j=mo8o+mo5o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+mo4j=mo8o+mo4o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+mo3j=mo8o+mo3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+mo2j=mo8o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+momj=mo8o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+mo7j=mo7o+mo7o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+mo6j=mo7o+mo6o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+mo5j=mo7o+mo5o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+mo4j=mo7o+mo4o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+mo3j=mo7o+mo3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+mo2j=mo7o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+momj=mo7o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo6oo+mo6j=mo6o+mo6o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo6oo+mo5j=mo6o+mo5o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo6oo+mo4j=mo6o+mo4o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo6oo+mo3j=mo6o+mo3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo6oo+mo2j=mo6o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo6oo+momj=mo6o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo5oo+mo5j=mo5o+mo5o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo5oo+mo4j=mo5o+mo4o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo5oo+mo3j=mo5o+mo3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo5oo+mo2j=mo5o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo5oo+momj=mo5o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo4oo+mo4j=mo4o+mo4o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo4oo+mo3j=mo4o+mo3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo4oo+mo2j=mo4o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo4oo+momj=mo4o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo3oo+mo3j=mo3o+mo3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo3oo+mo2j=mo3o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo3oo+momj=mo3o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo2oo+mo2j=mo2o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo2oo+momj=mo2o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
momoo+momj=momo+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mo8j=oh+mo8o               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mo7j=oh+mo7o               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mo6j=oh+mo6o               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mo5j=oh+mo5o               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mo4j=oh+mo4o               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mo3j=oh+mo3o               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mo2j=oh+mo2o               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+momj=oh+momo               7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo8oo+ch3=mo8o+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo7oo+ch3=mo7o+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo6oo+ch3=mo6o+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo5oo+ch3=mo5o+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo4oo+ch3=mo4o+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo3oo+ch3=mo3o+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mo2oo+ch3=mo2o+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
momoo+ch3=momo+ch3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mo8j=ch3o+mo8o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mo7j=ch3o+mo7o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mo6j=ch3o+mo6o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mo5j=ch3o+mo5o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mo4j=ch3o+mo4o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mo3j=ch3o+mo3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mo2j=ch3o+mo2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+momj=ch3o+momo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!!!!!!
mo8ooh=mo8o+oh                 1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mo7ooh=mo7o+oh                 9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mo6ooh=mo6o+oh                 9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mo5ooh=mo5o+oh                 9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mo4ooh=mo4o+oh                 9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mo3ooh=mo3o+oh                 9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mo2ooh=mo2o+oh                 5.950e+15   0.00  4.254e+04   !17  anc,
tertiary s
momooh=momo+oh                 1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
ch2o+mhp7j=mo8o                1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch3hco+mhx6j=mo7o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch3+mhp7*o=mo7o                1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
```

```
anc7, alk to te
ethco+mpe5j=mo6o        1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18  anc7, alk
to te
c2h5+mhx6*o=mo6o        1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc3h7hco+mb4j=mo5o      1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc3h7+mpe5*o=mo5o       1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc4h9hco+mp3j=mo4o      1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
pc4h9+mb4*o=mo4o        1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
c5h11hco+me2j=mo3o      1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
Ac5h11+mp3*o=mo3o       1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18  anc7, alk
to te
c6h13hco+ch3co2=mo2o    1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
Ac6h13+me2*o=mo2o       1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18  anc7, alk
to te
ch2o+oaoj=momo          1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mo8*o+h=mo8o            6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
mom*o+h=momo            6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
!!!!!!
mo7d+ho2=mo8ooh7j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo7d+ho2=mo7ooh8j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo6d+ho2=mo7ooh6j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo6d+ho2=mo6ooh7j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5d+ho2=mo6ooh5j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5d+ho2=mo5ooh6j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4d+ho2=mo5ooh4j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4d+ho2=mo4ooh5j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3d+ho2=mo4ooh3j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3d+ho2=mo3ooh4j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo2d+ho2=mo3ooh2j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo2d+ho2=mo2ooh3j       1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo8ooh6j=>mhp6d+ch2o+oh       2.000e+13   0.00  3.100e+04   !
mo8ooh5j=>mhx5d+c2h4o2h       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo8ooh4j=>mpe4d+c3h6ooh1-3    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo7ooh5j=>mhx5d+ch3hco+oh     2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo7ooh4j=>mpe4d+c3h6ooh2-1    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo7ooh3j=>mb3d+c2h4+ch3hco+oh 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo6ooh8j=>mhx6*o+c2h4+oh      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo6ooh4j=>mpe4d+ethco+oh      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo6ooh3j=>mb3d+c4h8+ho2 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo6ooh2j=>mp2d+c2h4+ethco+oh  2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo5ooh8j=>mhx5ooh6j+c2h4      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo5ooh7j=>mpe5*o+c3h6+oh      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo5ooh3j=>mb3d+nc3h7hco+oh    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo5ooh2j=>mp2d+c5h10+ho2      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo4ooh8j=>mhx4ooh6j+c2h4      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo4ooh7j=>mpe4d+c3h6+ho2      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo4ooh6j=>mb4*o+c4h8+oh 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo4ooh2j=>mp2d+nc4h9hco+oh    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo3ooh7j=>mp3*o+oh+c2h4+c3h6  2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo3ooh6j=>mb3ooh4j+c4h8 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo3ooh5j=>mp3*o+c5h10+oh      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo2ooh6j=>mb2ooh4j+c4h8 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo2ooh5j=>mp2d+c5h10+ho2      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo2ooh4j=>me2*o+c6h12-1+oh    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mo2oohmj=>ch2o+co+c6h13hco+oh 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
momooh2j=>ch2o+c7h14co+ho2    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
!!!!!!
mo8ooh6j=>mocy8o6+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo8ooh5j=>mocy8o5+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo8ooh4j=>mocy8o4+oh          1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mo7ooh5j=>mocy7o5+oh          9.100e+10   0.00  1.260e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo7ooh4j=>mocy7o4+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo7ooh3j=>mocy7o3+oh          1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mo6ooh8j=>mocy8o6+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo6ooh4j=>mocy6o4+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo6ooh3j=>mocy6o3+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo6ooh2j=>mocy6o2+oh          1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mo5ooh8j=>mocy8o5+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo5ooh7j=>mocy7o5+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo5ooh3j=>mocy5o3+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo5ooh2j=>mocy5o2+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo4ooh8j=>mocy8o4+oh          1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mo4ooh7j=>mocy7o4+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo4ooh6j=>mocy6o4+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo4ooh2j=>mocy4o2+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo3ooh7j=>mocy7o3+oh          1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mo3ooh6j=>mocy6o3+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo3ooh5j=>mocy5o3+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo2ooh6j=>mocy6o2+oh          1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mo2ooh5j=>mocy5o2+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mo2ooh4j=>mocy4o2+oh          9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mo2oohmj=>mocy2om+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
momooh2j=>mocy2om+oh          3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!!!!!!
mocy8o6+h=>mhx6j*o+c2h4+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o6+h=>mhp6d+hco+h2             4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o5+h=>mhx6j5*o+c2h4+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o5+h=>mhx5d+ch2hco+h2          4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o4+h=>mhx6j4*o+c2h4+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o4+h=>mpe4d+ch2ch2hco+h2       4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o5+h=>mpe5j*o+c3h6+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o5+h=>mhx5d+ch3co+h2           2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o4+h=>mpe5j4*o+c3h6+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o4+h=>mpe4d+ch2coch3+h2        2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o3+h=>mpe5j3*o+c3h6+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o3+h=>mb3d+ch3coc2h4p+h2       2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o4+h=>mb4j*o+c4h8+h2           2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o4+h=>mpe4d+c2h5co+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o3+h=>mb4j3*o+c4h8+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o3+h=>mb3d+c2h5coch2+h2        2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o2+h=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2            9.600e+08   1.50  2.005e+03
!25  dbr, see sheet*4
mocy5o3+h=>mp3j*o+c5h10+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy5o3+h=>mb3d+c3h7co+h2           2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mocy5o2+h=>mp2d+nc3h7coch2+h2       9.600e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet*4
mocy4o2+h=>mp2d+nc4h9co+h2          9.600e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet*4
mocy2om+h=>c7h14co+ocho+h2          1.920e+09   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet*4
mocy8o6+oh=>mhx6j*o+c2h4+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o6+oh=>mhp6d+hco+h2o           2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o5+oh=>mhx6j5*o+c2h4+h2o       1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o5+oh=>mhx5d+ch2hco+h2o        2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o4+oh=>mhx6j4*o+c2h4+h2o       1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy8o4+oh=>mpe4d+ch2ch2hco+h2o           2.400e+06   2.00 -1.192e+03
!25  dbr, see sheet
mocy7o5+oh=>mpe5j*o+c3h6+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o5+oh=>mhx5d+ch3co+h2o         1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o4+oh=>mpe5j4*o+c3h6+h2o       1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o4+oh=>mpe4d+ch2coch3+h2o      1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o3+oh=>mpe5j3*o+c3h6+h2o       1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy7o3+oh=>mb3d+ch3coc2h4p+h2o           1.200e+06   2.00 -1.192e+03
!25  dbr, see sheet
mocy6o4+oh=>mb4j*o+c4h8+h2o         1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o4+oh=>mpe4d+c2h5co+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o3+oh=>mb4j3*o+c4h8+h2o  1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25  dbr,
see sheet
mocy6o3+oh=>mb3d+c2h5coch2+h2o      1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy6o2+oh=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2o          4.800e+06   2.00 -1.192e+03
!25  dbr, see sheet*4
mocy5o3+oh=>mp3j*o+c5h10+h2o  1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25  dbr,
see sheet
mocy5o3+oh=>mb3d+c3h7co+h2o         1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mocy5o2+oh=>mp2d+nc3h7coch2+h2o     4.800e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mocy4o2+oh=>mp2d+nc4h9co+h2o        4.800e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mocy2om+oh=>c7h14co+ocho+h2o        9.600e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mocy8o6+ho2=>mhx6j*o+c2h4+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mocy8o6+ho2=>mhp6d+hco+h2o2         4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan
mocy8o5+ho2=>mhx6j5*o+c2h4+h2o2     2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mocy8o5+ho2=>mhx5d+ch2hco+h2o2      4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan
mocy8o4+ho2=>mhx6j4*o+c2h4+h2o2     2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mocy8o4+ho2=>mpe4d+ch2ch2hco+h2o2   4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan
mocy7o5+ho2=>mpe5j*o+c3h6+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mocy7o5+ho2=>mhx5d+ch3co+h2o2       2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mocy7o4+ho2=>mpe5j4*o+c3h6+h2o2     2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mocy7o4+ho2=>mpe4d+ch2coch3+h2o2    2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mocy7o3+ho2=>mpe5j3*o+c3h6+h2o2     2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mocy7o3+ho2=>mb3d+ch3coc2h4p+h2o2   2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mocy6o4+ho2=>mb4j*o+c4h8+h2o2 2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25  my
evans-polyan
mocy6o4+ho2=>mpe4d+c2h5co+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mocy6o3+ho2=>mb4j3*o+c4h8+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mocy6o3+ho2=>mb3d+c2h5coch2+h2o2    2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mocy6o2+ho2=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2o2  8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mocy5o3+ho2=>mp3j*o+c5h10+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
```

```
mocy5o3+ho2=>mb3d+c3h7co+h2o2 2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25  my
evans-polyan
mocy5o2+ho2=>mp2d+nc3h7coch2+h2o2   8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mocy4o2+ho2=>mp2d+nc4h9co+h2o2      8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mocy2om+ho2=>c7h14co+ocho+h2o2      1.600e+13   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan*4
mocy8o6+ch3o=>mhx6j*o+c2h4+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy8o6+ch3o=>mhp6d+hco+ch3oh       2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy8o5+ch3o=>mhx6j5*o+c2h4+ch3oh   1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy8o5+ch3o=>mhx5d+ch2hco+ch3oh    2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy8o4+ch3o=>mhx6j4*o+c2h4+ch3oh   1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy8o4+ch3o=>mpe4d+ch2ch2hco+ch3oh 2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy7o5+ch3o=>mpe5j*o+c3h6+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy7o5+ch3o=>mhx5d+ch3co+ch3oh     1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy7o4+ch3o=>mpe5j4*o+c3h6+ch3oh   1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy7o4+ch3o=>mpe4d+ch2coch3+ch3oh  1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy7o3+ch3o=>mpe5j3*o+c3h6+ch3oh   1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy7o3+ch3o=>mb3d+ch3coc2h4p+ch3oh 1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy6o4+ch3o=>mb4j*o+c4h8+ch3oh     1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy6o4+ch3o=>mpe4d+c2h5co+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c4h8+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy6o3+ch3o=>mb3d+c2h5coch2+ch3oh  1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy6o2+ch3o=>mp2d+c2h5coc2h4p+ch3oh      4.380e+11   0.00  5.000e+03
!25  my evans-polyan*4
mocy5o3+ch3o=>mp3j*o+c5h10+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy5o3+ch3o=>mb3d+c3h7co+ch3oh     1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mocy5o2+ch3o=>mp2d+nc3h7coch2+ch3oh 4.380e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mocy4o2+ch3o=>mp2d+nc4h9co+ch3oh    4.380e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mocy2om+ch3o=>c7h14co+ocho+ch3oh    8.760e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mocy8o6+ch3o2=>mhx6j*o+c2h4+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy8o6+ch3o2=>mhp6d+hco+ch3o2h           4.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan
mocy8o5+ch3o2=>mhx6j5*o+c2h4+ch3o2h 2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy8o5+ch3o2=>mhx5d+ch2hco+ch3o2h  4.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy8o4+ch3o2=>mhx6j4*o+c2h4+ch3o2h 2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy8o4+ch3o2=>mpe4d+ch2ch2hco+ch3o2h     4.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan
```

```
mocy7o5+ch3o2=>mpe5j*o+c3h6+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy7o5+ch3o2=>mhx5d+ch3co+ch3o2h   2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy7o4+ch3o2=>mpe5j4*o+c3h6+ch3o2h 2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy7o4+ch3o2=>mpe4d+ch2coch3+ch3o2h      2.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan
mocy7o3+ch3o2=>mpe5j3*o+c3h6+ch3o2h 2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy7o3+ch3o2=>mb3d+ch3coc2h4p+ch3o2h     2.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan
mocy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c4h8+ch3o2h   2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy6o4+ch3o2=>mpe4d+c2h5co+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c4h8+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy6o3+ch3o2=>mb3d+c2h5coch2+ch3o2h      2.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan
mocy6o2+ch3o2=>mp2d+c2h5coc2h4p+ch3o2h    8.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan*4
mocy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c5h10+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy5o3+ch3o2=>mb3d+c3h7co+ch3o2h   2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mocy5o2+ch3o2=>mp2d+nc3h7coch2+ch3o2h     8.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan*4
mocy4o2+ch3o2=>mp2d+nc4h9co+ch3o2h  8.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan*4
mocy2om+ch3o2=>c7h14co+ocho+ch3o2h  1.600e+13   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan*4
!!!!!
mo8ooh7oo=>mo7ooh8*o+oh             3.300e+09   1.00  3.550e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)
mo8ooh6oo=>mo6ooh8*o+oh             5.700e+08   1.00  2.800e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)
mo8ooh5oo=>mo5ooh8*o+oh             1.000e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)
mo8ooh4oo=>mo4ooh8*o+oh             1.700e+07   1.00  2.400e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 2Hp)
mo7ooh8oo=>mo8ooh7*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo7ooh6oo=>mo6ooh7*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo7ooh5oo=>mo5ooh7*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo7ooh4oo=>mo4ooh7*o+oh             5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mo7ooh3oo=>mo3ooh7*o+oh             8.600e+06   1.00  2.100e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Hs)
mo6ooh8oo=>mo8ooh6*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo6ooh7oo=>mo7ooh6*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo6ooh5oo=>mo5ooh6*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo6ooh4oo=>mo4ooh6*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo6ooh3oo=>mo3ooh6*o+oh             5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mo6ooh2oo=>mo2ooh6*o+oh             8.600e+06   1.00  2.100e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Hs)
mo5ooh8oo=>mo8ooh5*o+oh             5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
```

```
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mo5ooh7oo=>mo7ooh5*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo5ooh6oo=>mo6ooh5*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo5ooh4oo=>mo4ooh5*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo5ooh3oo=>mo3ooh5*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo5ooh2oo=>mo2ooh5*o+oh             5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mo3ooh7oo=>mo7ooh3*o+oh             8.600e+06   1.00  2.100e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Hs)
mo4ooh7oo=>mo7ooh4*o+oh             5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mo4ooh6oo=>mo6ooh4*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo4ooh5oo=>mo5ooh4*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo4ooh3oo=>mo3ooh4*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo4ooh2oo=>mo2ooh4*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo3ooh6oo=>mo6ooh3*o+oh             5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mo3ooh5oo=>mo5ooh3*o+oh             2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mo3ooh4oo=>mo4ooh3*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo3ooh2oo=>mo2ooh3*o+oh             1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mo2ooh6oo=>mo6ooh2*o+oh             8.500e+06   1.00  1.600e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Ht)-
2kcal
mo2ooh5oo=>mo5ooh2*o+oh             5.000e+07   1.00  1.700e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)-
2kcal
mo2ooh4oo=>mo4ooh2*o+oh             2.850e+07   1.00  2.000e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Ht)-
2kcal
mo2ooh3oo=>mo3ooh2*o+oh             1.650e+09   1.00  2.750e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Ht)-
2kcal
mo2oohmoo=>momooh2*o+oh             5.000e+07   1.00  2.170e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)+
2.7poster ECM
momooh2oo=>mo2oohm*o+oh             1.000e+08   1.00  2.850e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)+
3.5poster ECM
!!!!!!
mo7ooh8*o=>mhp7*o+hco+oh            1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo6ooh8*o=>mhx6*o+ch2hco+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh8*o=>mpe5*o+ch2ch2hco+oh            1.00e+16   0.00  4.30e+04
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh8*o=>mb4j+choc2h4cho+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh8*o=>mb4*o+c3h6cho-1+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh8*o=>mp3j+choc3h6cho+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo8ooh7*o=>mhp7j*o+ch2o+oh          1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
```

```
mo6ooh7*o=>mhx6*o+ch3co+oh          1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh7*o=>mpe5*o+ch2coch3+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh7*o=>mb4j+c4ald3oxo+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh7*o=>mb4*o+ch3coc2h4p+oh            1.00e+16   0.00  4.30e+04
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh7*o=>mp3j+c5ald4oxo+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3ooh7*o=>me2j+c6ald5oxo+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo8ooh6*o=>mhp7j6*o+ch2o+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mo7ooh6*o=>mhx6j*o+ch3hco+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh6*o=>mpe5*o+c2h5co+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh6*o=>mb4*o+c2h5coch2+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh6*o=>mp3j+c5ald3oxo+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3ooh6*o=>mp3*o+c2h5coc2h4p+oh           1.00e+16   0.00  4.30e+04
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3ooh6*o=>me2j+c6ald4oxo+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo2ooh6*o=>ch3co2+c7ald4oxo+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo8ooh5*o=>mhp7j5*o+ch2o+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mo7ooh5*o=>mhx6j5*o+ch3hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo6ooh5*o=>mpe5j*o+ethco+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh5*o=>mb4*o+c3h7co+oh          1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3ooh5*o=>mp3*o+nc3h7coch2+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3ooh5*o=>me2j+c6ald3oxo+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo2ooh5*o=>ch3co2+c7ald4oxo+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo8ooh4*o=>mhp7j4*o+ch2o+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mo7ooh4*o=>mhx6j4*o+ch3hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo6ooh4*o=>mpe5j4*o+ethco+oh  1.00e+16   0.00  4.30e+04   !Curran et
al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh4*o=>mb4j*o+nc3h7hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3ooh4*o=>mp3*o+nc4h9co+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo2ooh4*o=>ch3co2+c7ald3oxo+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo7ooh3*o=>mhx6j3*o+ch3hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo6ooh3*o=>mpe5j3*o+ethco+oh  1.00e+16   0.00  4.30e+04   !Curran et
al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh3*o=>mb4j3*o+nc3h7hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh3*o=>mp3j*o+nc4h9hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo2ooh3*o=>ch3co2+c5h11cocho+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
```

```
mo6ooh2*o=>mpe5j2*o+ethco+oh  1.00e+16   0.00  4.30e+04   !Curran et
al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo5ooh2*o=>mb4j2*o+nc3h7hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo4ooh2*o=>mp3j2*o+nc4h9hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mo3ooh2*o=>me2j*o+c5h11hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
momooh2*o=>oaoj2*o+ch2o+oh          1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mo2oohm*o=>choooco+c6h13hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!!!!!!
mo7d+o=mo7d6j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+o=mo7d2j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+h=mo7d6j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+h=mo7d2j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+oh=mo7d6j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+oh=mo7d2j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+ho2=mo7d6j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+ho2=mo7d2j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo7d+ch3o=mo7d6j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo7d+ch3o=mo7d2j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mo7d+oh=ch2o+mhp7j           1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mo7d+oh=ch3+mhp7*o           1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mo7d                =   me2j +   Fc6h11-1       2.500E+16  0.0
68000.0 !
mo7d                =   mp3j +   c5h915        1.000E+16  0.0
71000.0 !
mo7d                =   mb4j +   c4h7          1.000E+16  0.0
71000.0 !
mo7d                =   mpe5j +   ac3h5       1.000E+16  0.0
71000.0 !
c2h3    +   mhx6j     =   mo7d                  1.000E+13   0.0
0.0 !
mo7d  +     o2      = mo7d6j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mo7d  +     o2      = mo7d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mo7d  +     ch3     = mo7d6j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mo7d  +     ch3     = mo7d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mo7d  +      o      = mhp7j  +     hco         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mo7d6j +      h     = mo7d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mo7d6j=c4h6+mb4j              1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
mo7d2j=c5h915+mp2d            1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
c7h12co+ch3o=mo7d2j           5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
!!!!!!
mo6d+o=mo7d6j+oh              1.740e+11   0.70  5.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mo6d+o=mo6d5j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+o=mo6d2j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+h=mo7d6j+h2              1.740e+05   2.50  2.510e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp)
mo6d+h=mo6d5j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+h=mo6d2j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+oh=mo7d6j+h2o            3.000e+06   2.00 -2.980e+02   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp)
mo6d+oh=mo6d5j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+oh=mo6d2j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+ho2=mo7d6j+h2o2          9.600e+03   2.60  1.390e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp)
mo6d+ho2=mo6d5j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+ho2=mo6d2j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo6d+ch3o=mo7d6j+ch3oh        1.980e+12   0.00  4.000e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (3Hp ally)
mo6d+ch3o=mo6d5j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo6d+ch3o=mo6d2j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mo6d+oh=ch3hco+mhx6j         1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mo6d+oh=c2h5+mhx6*o          1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mo6d  +     o2      = mo6d5j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mo6d  +     o2      = mo7d6j +     ho2         6.000E+12   0.0
37000.0 !
mo6d  +     o2      = mo6d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mo6d  +     ch3     = mo6d5j +     ch4         2.210E+00   3.5
5670.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp
ally)
!mo6d  +     ch3     = mo7d6j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mo6d  +     ch3     = mo6d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mo6d5j +      h     = mo6d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mo6d  +      o      = mhx6j  +   ch3co         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mo6d5j=c5h8-13+mp3j           1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
mo6d2j=Cc5h9-1+mp2d           1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
c7h12co+ch3o=mo6d2j           5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
!!!!!!
mo5d+o=mo6d5j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+o=mo5d4j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+o=mo5d2j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+h=mo6d5j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+h=mo5d4j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+h=mo5d2j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+oh=mo6d5j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+oh=mo5d4j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+oh=mo5d2j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+ho2=mo6d5j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+ho2=mo5d4j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+ho2=mo5d2j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo5d+ch3o=mo6d5j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo5d+ch3o=mo5d4j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo5d+ch3o=mo5d2j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mo5d+oh=ethco+mpe5j          1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mo5d+oh=nc3h7+mpe5*o         1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mo5d  +     o2      = mo6d5j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mo5d  +     o2      = mo5d4j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mo5d  +     o2      = mo5d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mo5d  +     ch3     = mo6d5j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mo5d  +     ch3     = mo5d4j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mo5d  +     ch3     = mo5d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mo5d  +      o      = mpe5j  +   c2h5co        1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mo5d4j +      h     = mo5d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mo5d4j=c6h10-13+me2j          1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
mo5d4j=mhp6d4d+ch3            1.300e+13   0.00  3.820e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (CH3+1,3-diene)
mo5d2j=Cc5h9-1+mp2d           1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
c7h12co+ch3o=mo5d2j           5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
!!!!!!
mo4d+o=mo5d4j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+o=mo4d3j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+o=mo4d2j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+h=mo5d4j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+h=mo4d3j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+h=mo4d2j+h2              5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+oh=mo5d4j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+oh=mo4d3j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+oh=mo4d2j+h2o            3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+ho2=mo5d4j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+ho2=mo4d3j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+ho2=mo4d2j+h2o2          6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo4d+ch3o=mo5d4j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo4d+ch3o=mo4d3j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo4d+ch3o=mo4d2j+ch3oh        1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mo4d+oh=nc3h7hco+mb4j        1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mo4d+oh=pc4h9+mb4*o          1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mo4d  +     o2      = mo4d3j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mo4d  +     o2      = mo5d4j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mo4d  +     o2      = mo4d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mo4d  +     ch3     = mo4d3j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mo4d  +     ch3     = mo5d4j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mo4d  +     ch3     = mo4d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mo4d  +      o      = mb4j  +   c3h7co        1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mo4d3j +      h     = mo4d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mo4d3j=c7h12+ch3co2           1.300e+13   0.00  3.390e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rt+1,3-diene)! A
reprendre
mo4d3j=mhx5d3d+c2h5           1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
mo4d2j=mp2d+c5h915            1.300e+13   0.00  5.000e+04   !
c7h12co+ch3o=mo4d2j           5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
!!!!!!
mo3d+o=mo4d3j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo3d+o=mo3d2j+oh              8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
```

```
mo3d+h=mo4d3j+h2               5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo3d+h=mo3d2j+h2               5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo3d+oh=mo4d3j+h2o             3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo3d+oh=mo3d2j+h2o             3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo3d+ho2=mo4d3j+h2o2           6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo3d+ho2=mo3d2j+h2o2           6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo3d+ch3o=mo4d3j+ch3oh         1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo3d+ch3o=mo3d2j+ch3oh         1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mo3d+oh=nc4h9hco+mp3j         1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mo3d+oh=Ac5h11+mp3*o          1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mo3d  +     o2      = mo4d3j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mo3d  +     o2      = mo3d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mo3d  +     ch3     = mo4d3j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mo3d  +     ch3     = mo3d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mo3d  +      o      = mp3j  +   nc4h9co        1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mo3d2j +      h     = mo3d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
c7h12co+ch3o=mo3d2j            5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
mo3d2j=mpe4d2d+nc3h7           1.300e+13   0.00  3.590e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
!!!!!!
mo2d+o=mo3d2j+oh               8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo2d+h=mo3d2j+h2               5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo2d+oh=mo3d2j+h2o             3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo2d+ho2=mo3d2j+h2o2           6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mo2d+ch3o=mo3d2j+ch3oh         1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mo2d  +     o2      = mo3d2j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
!mo2d  +     ch3     = mo3d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mo2d  +      o      = me2j  +   c5h11co        1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
!mo2d+oh=c5h11hco+me2j         1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mo2d+oh=Ac6h13+me2*o          1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!!!!!!
mo7d+oh=mo7oh8j                2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mo6d+oh=mo6oh7j                2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mo5d+oh=mo5oh6j                2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mo4d+oh=mo4oh5j                2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mo3d+oh=mo3oh4j                2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mo2d+oh=mo2oh3j                2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mo7oh8j+o2=mo7oh8oo            1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mo6oh7j+o2=mo6oh7oo            1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mo5oh6j+o2=mo5oh6oo            1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mo4oh5j+o2=mo4oh5oo            1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mo3oh4j+o2=mo3oh4oo            1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mo2oh3j+o2=mo2oh3oo            1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mo7oh8oo=>mhp7*o+oh+ch2o       1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mo6oh7oo=>mhx6*o+oh+ch3hco     1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mo5oh6oo=>mpe5*o+oh+ethco      1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mo4oh5oo=>mb4*o+oh+nc3h7hco    1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mo3oh4oo=>mp3*o+oh+nc4h9hco    1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mo2oh3oo=>me2*o+oh+c5h11hco    1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
!!!!!!
hco+mhp7j=mo8*o                1.000e+13   0.00  0.000e+00   !9
ALLARA and shaw
mo8*o+o2=mo8j*o+ho2            2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
mo8*o+h=mo8j*o+h2              4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
mo8*o+oh=mo8j*o+h2o            2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
mo8*o+o=mo8j*o+oh              5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mo8*o+ho2=mo8j*o+h2o2          2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
mo8j*o=mhp7j+co                1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mom*o+o2=momj*o+ho2            2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
mom*o+h=momj*o+h2              4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
mom*o+oh=momj*o+h2o            2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
mom*o+o=momj*o+oh              5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mom*o+ho2=momj*o+h2o2          2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
momj*o=oaoj+co                 1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!Methylheptanoate!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
mhp=mhp7j+h                    7.900e+15   0.0   9.797e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=mhp6j+h                    5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=mhp5j+h                    5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=mhp4j+h                    5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=mhp3j+h                    5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp2j+h=mhp                    1.000e+14   0.0   0.0         !1  rnc7
*: h +fragm
mhp=mhpmj+h                    7.900e+15   0.0   9.397e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608 (-4kcal prox O)
mhp=mhx6j+ch3                  5.000e+16   0.0   8.466e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=mpe5j+c2h5                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=mb4j+nc3h7                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=mp3j+pc4h9                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=me2j+Ac5h11                7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhp=ch3co2+Ac6h13       1.130e+16   0.0   7.770e+04   !asCH3COCH3
Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311 (-4kcal prox O)
c6h13co+ch3o=mhp               1.500e+13   0.0   0.0         !asDMC
Glaude et al., Proc.Combust.Inst. 31 (2005) 1111-1118
mhp=hpaoj+ch3                  3.160e+16   0.0   8.307e+04   !asDME
Batt et al., Proc. Combust. Inst. 19 (1982) 81-87
!!!!!!
mhp+o2=mhp7j+ho2               2.000e+13   0.0   5.087e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mhp+o2=mhp6j+ho2               4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mhp+o2=mhp5j+ho2               4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mhp+o2=mhp4j+ho2               4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mhp+o2=mhp3j+ho2               4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mhp+o2=mhp2j+ho2               4.000e+13   0.0   3.800e+04   !
Estimated
mhp+o2=mhpmj+ho2               2.050e+13   0.0   4.491e+04   !Dayma et
al., Proc. Combust. Inst.
!!!!!!
mhp+h=mhp7j+h2                 9.400e+04   2.75  6.280e+03   !2  anc7,
primary f
mhp+h=mhp6j+h2                 1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+h=mhp5j+h2                 1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+h=mhp4j+h2                 1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+h=mhp3j+h2                 1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+h=mhp2j+h2                 5.400e+04   2.5  -1.900e+03   !Touchard
et al., Int. J. Chem. Kinet, 37 (2005) 451-463
mhp+h=mhpmj+h2                 1.440e+13   0.0   6.095e+03   !(HELD
94)
mhp+o=mhp7j+oh                 9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mhp+o=mhp6j+oh                 4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+o=mhp5j+oh                 4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+o=mhp4j+oh                 4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+o=mhp3j+oh                 4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+o=mhp2j+oh                 8.800e+10   0.70  3.250e+03   !Touchard
et al., Int. J. Chem. Kinet, 37 (2005) 451-463
mhp+o=mhpmj+oh                 9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mhp+oh=mhp7j+h2o               5.250e+09   0.97  1.590e+03   !2  rnc7,
primary;
mhp+oh=mhp6j+h2o               4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mhp+oh=mhp5j+h2o               4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mhp+oh=mhp4j+h2o               4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mhp+oh=mhp3j+h2o               4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mhp+oh=mhp2j+h2o               3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs ally)
mhp+oh=mhpmj+h2o               7.100e+06   1.80 -5.960e+02   !(HELD
98)
mhp+ho2=mhp7j+h2o2             8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2  anc7,
primary f
mhp+ho2=mhp6j+h2o2             5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mhp+ho2=mhp5j+h2o2             5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mhp+ho2=mhp4j+h2o2             5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mhp+ho2=mhp3j+h2o2             5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mhp+ho2=mhp2j+h2o2             6.400e+03   2.60  1.240e+04   !Touchard
et al., Int. J. Chem. Kinet, 37 (2005) 451-463
mhp+ho2=mhpmj+h2o2             9.640e+10   0.00  1.258e+04   !(TSANG
87)
mhp+hco=mhp7j+ch2o             1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mhp+hco=mhp6j+ch2o             1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mhp+hco=mhp5j+ch2o             1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mhp+hco=mhp4j+ch2o             1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mhp+hco=mhp3j+ch2o             1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mhp+hco=mhp2j+ch2o             1.140e+09   1.30  1.550e+04   !ST
mhp+hco=mhpmj+ch2o             1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mhp+ch3=mhp7j+ch4              4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mhp+ch3=mhp6j+ch4              2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch3=mhp5j+ch4              2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch3=mhp4j+ch4              2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch3=mhp3j+ch4              2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch3=mhp2j+ch4              1.000e+11   0.00  7.300e+03   !Touchard
et al., Int. J. Chem. Kinet, 37 (2005) 451-463
mhp+ch3=mhpmj+ch4              4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mhp+ch3o=mhp7j+ch3oh           1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mhp+ch3o=mhp6j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch3o=mhp5j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
```

```
mhp+ch3o=mhp4j+ch3oh          1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch3o=mhp3j+ch3oh          1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch3o=mhp2j+ch3oh          1.780e+12   0.00  1.200e+03   !
mhp+ch3o=mhpmj+ch3oh          1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mhp+ch2oh=mhp7j+ch3oh         1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mhp+ch2oh=mhp6j+ch3oh         1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch2oh=mhp5j+ch3oh         1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch2oh=mhp4j+ch3oh         1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch2oh=mhp3j+ch3oh         1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhp+ch2oh=mhp2j+ch3oh         3.600e+01   2.95  1.000e+04   !
mhp+ch2oh=mhpmj+ch3oh         1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mhp+ch3o2=mhp7j+ch3o2h        8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2
corrected to ag
mhp+ch3o2=mhp6j+ch3o2h        5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mhp+ch3o2=mhp5j+ch3o2h        5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mhp+ch3o2=mhp4j+ch3o2h        5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mhp+ch3o2=mhp3j+ch3o2h        5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mhp+ch3o2=mhp2j+ch3o2h        6.400e+03   2.60  1.240e+04   !2  same
as ho2
mhp+ch3o2=mhpmj+ch3o2h        8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2
corrected to ag
mhp+c2h3=mhp7j+c2h4           5.010e+11   0.00  1.800e+04   !2  rnc7,
primary;
mhp+c2h3=mhp6j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h3=mhp5j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h3=mhp4j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h3=mhp3j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h3=mhp2j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.430e+04   !2  rnc7
*, tertiary
mhp+c2h3=mhpmj+c2h4           5.010e+11   0.00  1.800e+04   !2  rnc7
**, primary
mhp+c2h5=mhp7j+c2h6           5.010e+10   0.00  1.340e+04   !2  rnc7,
primary;
mhp+c2h5=mhp6j+c2h6           5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h5=mhp5j+c2h6           5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h5=mhp4j+c2h6           5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h5=mhp3j+c2h6           5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mhp+c2h5=mhp2j+c2h6           2.200e+00   3.50  4.140e+03   !
mhp+c2h5=mhpmj+c2h6           5.010e+10   0.00  1.340e+04   !2  rnc7
**, primary
mhp+ac3h5=mhp7j+c3h6          1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhp+ac3h5=mhp6j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+ac3h5=mhp5j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+ac3h5=mhp4j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+ac3h5=mhp3j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+ac3h5=mhp2j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.717e+04   !ST
mhp+ac3h5=mhpmj+c3h6          1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhp+mhp2j=mhp7j+mhp           1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhp+mhp2j=mhp6j+mhp           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+mhp2j=mhp5j+mhp           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+mhp2j=mhp4j+mhp           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+mhp2j=mhp3j+mhp           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhp+mhp2j=mhpmj+mhp           1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhp+mhp7oo=mhp7j+mhp7ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp7oo=mhp6j+mhp7ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp7oo=mhp5j+mhp7ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp7oo=mhp4j+mhp7ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp7oo=mhp3j+mhp7ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp7oo=mhp2j+mhp7ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhp+mhp7oo=mhpmj+mhp7ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp6oo=mhp7j+mhp6ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp6oo=mhp6j+mhp6ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp6oo=mhp5j+mhp6ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp6oo=mhp4j+mhp6ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp6oo=mhp3j+mhp6ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp6oo=mhp2j+mhp6ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhp+mhp6oo=mhpmj+mhp6ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp5oo=mhp7j+mhp5ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp5oo=mhp6j+mhp5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp5oo=mhp5j+mhp5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp5oo=mhp4j+mhp5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp5oo=mhp3j+mhp5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp5oo=mhp2j+mhp5ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhp+mhp5oo=mhpmj+mhp5ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp4oo=mhp7j+mhp4ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp4oo=mhp6j+mhp4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp4oo=mhp5j+mhp4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp4oo=mhp4j+mhp4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp4oo=mhp3j+mhp4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp4oo=mhp2j+mhp4ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhp+mhp4oo=mhpmj+mhp4ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp3oo=mhp7j+mhp3ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp3oo=mhp6j+mhp3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp3oo=mhp5j+mhp3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp3oo=mhp4j+mhp3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp3oo=mhp3j+mhp3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp3oo=mhp2j+mhp3ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhp+mhp3oo=mhpmj+mhp3ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp2oo=mhp7j+mhp2ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp2oo=mhp6j+mhp2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp2oo=mhp5j+mhp2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp2oo=mhp4j+mhp2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp2oo=mhp3j+mhp2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhp2oo=mhp2j+mhp2ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhp+mhp2oo=mhpmj+mhp2ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhpmoo=mhp7j+mhpmooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhpmoo=mhp6j+mhpmooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhpmoo=mhp5j+mhpmooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhpmoo=mhp4j+mhpmooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhpmoo=mhp3j+mhpmooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhp+mhpmoo=mhp2j+mhpmooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhp+mhpmoo=mhpmj+mhpmooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!!!!!!
!mhp7j+o2=mhp7oo              9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!mhp6j+o2=mhp6oo              1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!mhp5j+o2=mhp5oo              1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!mhp4j+o2=mhp4oo              1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!mhp3j+o2=mhp3oo              1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
!mhp2j+o2=mhp2oo              1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!mhpmj+o2=mhpmoo              4.500e+12   0.00        0.0   !10  nc7;
primary
!mhpmj+o2=mhpmoo              3.500E+11   0.0     -1700.0   !Dagaut
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001) 61-84
mhp7ooh6j+o2=mhp7ooh6oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhp7ooh5j+o2=mhp7ooh5oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhp7ooh4j+o2=mhp7ooh4oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhp7ooh3j+o2=mhp7ooh3oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhp6ooh7j+o2=mhp6ooh7oo       1.500e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
mhp6ooh5j+o2=mhp6ooh5oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhp6ooh4j+o2=mhp6ooh4oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhp6ooh3j+o2=mhp6ooh3oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhp6ooh2j+o2=mhp6ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhp5ooh7j+o2=mhp5ooh7oo       9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhp5ooh6j+o2=mhp5ooh6oo       9.500e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
mhp5ooh4j+o2=mhp5ooh4oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhp5ooh3j+o2=mhp5ooh3oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhp5ooh2j+o2=mhp5ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhp4ooh7j+o2=mhp4ooh7oo       9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhp4ooh6j+o2=mhp4ooh6oo       1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
mhp4ooh5j+o2=mhp4ooh5oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhp4ooh3j+o2=mhp4ooh3oo       3.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2kt)
mhp4ooh2j+o2=mhp4ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhp3ooh7j+o2=mhp3ooh7oo       9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhp3ooh6j+o2=mhp3ooh6oo       1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
mhp3ooh5j+o2=mhp3ooh5oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhp3ooh4j+o2=mhp3ooh4oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhp3ooh2j+o2=mhp3ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhp2ooh6j+o2=mhp2ooh6oo       1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
mhp2ooh5j+o2=mhp2ooh5oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhp2ooh4j+o2=mhp2ooh4oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhp2ooh3j+o2=mhp2ooh3oo       1.000e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kq)
mhp2oohmj+o2=mhp2oohmoo       3.500E+11   0.0     -1700.0   !Dagaut
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001) 61-84
mhpmooh2j+o2=mhpmooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!!!!!!
mhp7j=mhp4j                   9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp7j=mhp3j                   1.700e+07   1.00  1.200e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhp6j=>mhp3j                  9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp3j=>mhp6j                  9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp3j=mhpmj                   2.500e+07   1.00  1.450e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mhp2j=mhp7j                   4.400e+06   1.00  1.990e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 3Hp)
mhp2j=mhp6j                   1.700e+07   1.00  1.200e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhp2j=mhp5j                   9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp2j=mhpmj                   1.500e+08   1.00  2.280e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 3Hp)+3kcal
mhpmj=mhp4j                   2.900e+06   1.00  1.740e+04   !Glaude
```

```
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mhp7oo=mhp7ooh6j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp7oo=mhp7ooh5j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhp7oo=mhp7ooh4j              1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mhp7oo=mhp7ooh3j              1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mhp6oo=mhp6ooh7j              4.950e+09   1.00  3.550e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 3Hp)
mhp6oo=mhp6ooh5j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp6oo=mhp6ooh4j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhp6oo=mhp6ooh3j              1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
!mhp6oo=mhp6ooh2j             1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mhp6oo=mhp6ooh2j              1.700e+07   1.00  1.600e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Ht)-2kcal
mhp5oo=mhp5ooh7j              8.550e+08   1.00  2.800e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mhp5oo=mhp5ooh6j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp5oo=mhp5ooh4j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp5oo=mhp5ooh3j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mhp5oo=mhp5ooh2j             1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
!mhp5oo=mhp5ooh2j             1.000e+08   1.00  1.950e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs ally)
mhp5oo=mhp5ooh2j              1.000e+08   1.00  1.700e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)-2kcal
mhp4oo=mhp4ooh7j              1.500e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)
mhp4oo=mhp4ooh6j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhp4oo=mhp4ooh5j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhp4oo=mhp4ooh3j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhp4oo=mhp4ooh2j             5.700e+08   1.00  2.550e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mhp4oo=mhp4ooh2j             5.700e+08   1.00  2.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs ally)
mhp4oo=mhp4ooh2j              5.700e+08   1.00  1.800e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Ht)-2kcal
mhp3oo=mhp3ooh7j              2.500e+07   1.00  2.400e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 3Hp)
mhp3oo=mhp3ooh6j              1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mhp3oo=mhp3ooh5j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhp3oo=mhp3ooh4j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhp3oo=mhp3ooh2j             3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhp3oo=mhp3ooh2j             3.300e+09   1.00  3.000e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs ally)
mhp3oo=mhp3ooh2j              3.300e+09   1.00  2.750e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Ht)-2kcal
!mhp3oo=mhp3ooh2j             2.837e+12   0.00  2.779e+04   !12
```

```
paper rs values
mhp2oo=mhp2ooh6j              1.720e+07   1.00  2.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Hs)
mhp2oo=mhp2ooh5j              1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mhp2oo=mhp2ooh4j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhp2oo=mhp2ooh3j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhp2oo=mhp2ooh3j             1.088e+12   0.00  2.921e+04   !12
paper rs values
mhp2oo=mhp2oohmj              1.500e+08   1.00  2.850e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+3.5poster
ECM
mhpmoo=mhpmooh2j              1.000e+08   1.00  2.170e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+2.7poster
ECM
mhp7ooh6oo=>mhp6ooh7oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp6ooh7oo=>mhp7ooh6oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp6ooh5oo=>mhp5ooh6oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp5ooh6oo=>mhp6ooh5oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp5ooh4oo=>mhp4ooh5oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp4ooh5oo=>mhp5ooh4oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp4ooh3oo=>mhp3ooh4oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp3ooh4oo=>mhp4ooh3oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp3ooh2oo=>mhp2ooh3oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhp2ooh3oo=>mhp3ooh2oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!!!!!!
mhp7j=c2h4+mpe5j              2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhp6j=c3h6+mb4j               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhp5j=c4h8+mp3j               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhp5j=ch3+mhx5d               1.000e+13   0.00  3.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp4j=c5h10+me2j        2.000e+13   0.00  2.470e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (-4kcal)
mhp4j=c2h5+mpe4d              2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhp3j=c6h12-1+ch3co2          2.000e+13   0.00  3.050e+04   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (-4kcal)
mhp3j=nc3h7+mb3d              2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhp2j=pc4h9+mp2d              2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
c6h12co+ch3o=mhp2j            5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
mhpmj=ch2o+c6h13co            1.640e+22  -2.33  3.195e+04   !Dooley
et al., Combust. Flame, 153 (2008) 2-32
!!!!!!!!!!co2+Ac6h13=hpaoj                1.000e+11   0.00  3.936e+04
!3  since reaction
mhp7j=h+mhp6d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
```

```
mhp6j=h+mhp6d                 3.000e+13   0.00  3.900e+04   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (3Hp)
mhp6j=h+mhp5d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhp5j=h+mhp5d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhp5j=h+mhp4d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhp4j=h+mhp4d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhp4j=h+mhp3d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhp3j=h+mhp3d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhp3j=h+mhp2d                 3.200e+13   0.00  3.480e+04   !Touchard
(2005) Th?se INPL (2Hs ally)
mhp2j=h+mhp2d                 3.000e+13   0.00  5.000e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
!!!!!!
mhp7j+o2=mhp6d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp6j+o2=mhp6d+ho2            8.070e+11   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp6j+o2=mhp5d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp5j+o2=mhp5d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp5j+o2=mhp4d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp4j+o2=mhp4d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp4j+o2=mhp3d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp3j+o2=mhp3d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhp3j+o2=mhp2d+ho2            2.600e+11   0.00  2.500e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
mhp2j+o2=mhp2d+ho2            1.580e+12   0.00  1.520e+04   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
!!!!!!
mhp7oo+mhp7oo=>mhp7o+mhp7o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp7oo+mhp6oo=>mhp7o+mhp6o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp7oo+mhp5oo=>mhp7o+mhp5o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp7oo+mhp4oo=>mhp7o+mhp4o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp7oo+mhp3oo=>mhp7o+mhp3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp7oo+mhp2oo=>mhp7o+mhp2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp7oo+mhpmoo=>mhp7o+mhpmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp6oo+mhp6oo=>mhp6o+mhp6o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp6oo+mhp5oo=>mhp6o+mhp5o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp6oo+mhp4oo=>mhp6o+mhp4o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp6oo+mhp3oo=>mhp6o+mhp3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp6oo+mhp2oo=>mhp6o+mhp2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
```

```
mhp6oo+mhpmoo=>mhp6o+mhpmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp5oo+mhp5oo=>mhp5o+mhp5o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp5oo+mhp4oo=>mhp5o+mhp4o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp5oo+mhp3oo=>mhp5o+mhp3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp5oo+mhp2oo=>mhp5o+mhp2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp5oo+mhpmoo=>mhp5o+mhpmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp4oo+mhp4oo=>mhp4o+mhp4o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp4oo+mhp3oo=>mhp4o+mhp3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp4oo+mhp2oo=>mhp4o+mhp2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp4oo+mhpmoo=>mhp4o+mhpmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp3oo+mhp3oo=>mhp3o+mhp3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp3oo+mhp2oo=>mhp3o+mhp2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp3oo+mhpmoo=>mhp3o+mhpmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp2oo+mhp2oo=>mhp2o+mhp2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp2oo+mhpmoo=>mhp2o+mhpmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhpmoo+mhpmoo=>mhpmo+mhpmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhp7oo+ch3o2=>mhp7o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhp6oo+ch3o2=>mhp6o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhp5oo+ch3o2=>mhp5o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhp4oo+ch3o2=>mhp4o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhp3oo+ch3o2=>mhp3o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhp2oo+ch3o2=>mhp2o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhpmoo+ch3o2=>mhpmo+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!!!!!!
mhp7oo+ho2=mhp7ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhp6oo+ho2=mhp6ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhp5oo+ho2=mhp5ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhp4oo+ho2=mhp4ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhp3oo+ho2=mhp3ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhp2oo+ho2=mhp2ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhpmoo+ho2=mhpmooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhp7oo+h2o2=>mhp7ooh+ho2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp7ooh+ho2=>mhp7oo+h2o2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp6oo+h2o2=>mhp6ooh+ho2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp6ooh+ho2=>mhp6oo+h2o2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp5oo+h2o2=>mhp5ooh+ho2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
```

```
mhp5ooh+ho2=>mhp5oo+h2o2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp4oo+h2o2=>mhp4ooh+ho2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp4ooh+ho2=>mhp4oo+h2o2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp3oo+h2o2=>mhp3ooh+ho2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp3ooh+ho2=>mhp3oo+h2o2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp2oo+h2o2=>mhp2ooh+ho2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhp2ooh+ho2=>mhp2oo+h2o2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhpmoo+h2o2=>mhpmooh+ho2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhpmooh+ho2=>mhpmoo+h2o2      2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!!!!!!
mhp7oo+mhp7j=mhp7o+mhp7o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp7oo+mhp6j=mhp7o+mhp6o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp7oo+mhp5j=mhp7o+mhp5o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp7oo+mhp4j=mhp7o+mhp4o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp7oo+mhp3j=mhp7o+mhp3o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp7oo+mhp2j=mhp7o+mhp2o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp7oo+mhpmj=mhp7o+mhpmo      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp6oo+mhp6j=mhp6o+mhp6o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp6oo+mhp5j=mhp6o+mhp5o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp6oo+mhp4j=mhp6o+mhp4o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp6oo+mhp3j=mhp6o+mhp3o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp6oo+mhp2j=mhp6o+mhp2o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp6oo+mhpmj=mhp6o+mhpmo      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp5oo+mhp5j=mhp5o+mhp5o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp5oo+mhp4j=mhp5o+mhp4o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp5oo+mhp3j=mhp5o+mhp3o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp5oo+mhp2j=mhp5o+mhp2o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp5oo+mhpmj=mhp5o+mhpmo      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp4oo+mhp4j=mhp4o+mhp4o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp4oo+mhp3j=mhp4o+mhp3o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp4oo+mhp2j=mhp4o+mhp2o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp4oo+mhpmj=mhp4o+mhpmo      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp3oo+mhp3j=mhp3o+mhp3o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp3oo+mhp2j=mhp3o+mhp2o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp3oo+mhpmj=mhp3o+mhpmo      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp2oo+mhp2j=mhp2o+mhp2o      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp2oo+mhpmj=mhp2o+mhpmo      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhpmoo+mhpmj=mhpmo+mhpmo      7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhp7j=oh+mhp7o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhp6j=oh+mhp6o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhp5j=oh+mhp5o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhp4j=oh+mhp4o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhp3j=oh+mhp3o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhp2j=oh+mhp2o            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhpmj=oh+mhpmo            7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp7oo+ch3=mhp7o+ch3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp6oo+ch3=mhp6o+ch3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp5oo+ch3=mhp5o+ch3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp4oo+ch3=mhp4o+ch3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp3oo+ch3=mhp3o+ch3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhp2oo+ch3=mhp2o+ch3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhpmoo+ch3=mhpmo+ch3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhp7j=ch3o+mhp7o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhp6j=ch3o+mhp6o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhp5j=ch3o+mhp5o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhp4j=ch3o+mhp4o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhp3j=ch3o+mhp3o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhp2j=ch3o+mhp2o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhpmj=ch3o+mhpmo        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!!!!!!
mhp7ooh=mhp7o+oh              1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mhp6ooh=mhp6o+oh              9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mhp5ooh=mhp5o+oh              9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mhp4ooh=mhp4o+oh              9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mhp3ooh=mhp3o+oh              9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mhp2ooh=mhp2o+oh              5.950e+15   0.00  4.254e+04   !17  anc,
tertiary s
mhpmooh=mhpmo+oh              1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
ch2o+mhx6j=mhp7o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch3hco+mpe5j=mhp6o            1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch3+mhx6*o=mhp6o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ethco+mb4j=mhp5o        1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18  anc7, alk
to te
c2h5+mpe5*o=mhp5o             1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc3h7hco+mp3j=mhp4o           1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc3h7+mb4*o=mhp4o             1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc4h9hco+me2j=mhp3o           1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
pc4h9+mp3*o=mhp3o             1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
c5h11hco+ch3co2=mhp2o         1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
Ac5h11+me2*o=mhp2o            1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch2o+hpaoj=mhpmo              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mhp7*o+h=mhp7o                6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
mhpm*o+h=mhpmo                6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
!!!!!!
mhp6d+ho2=mhp7ooh6j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp6d+ho2=mhp6ooh7j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5d+ho2=mhp6ooh5j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5d+ho2=mhp5ooh6j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4d+ho2=mhp5ooh4j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4d+ho2=mhp4ooh5j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3d+ho2=mhp4ooh3j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3d+ho2=mhp3ooh4j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp2d+ho2=mhp3ooh2j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp2d+ho2=mhp2ooh3j           1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp7ooh5j=>mhx5d+ch2o+oh      2.000e+13   0.00  3.100e+04   !
mhp7ooh4j=>mpe4d+c2h4o2h      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp7ooh3j=>mb3d+c3h6ooh1-3    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp6ooh4j=mpe4d+ch3hco+oh     2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp6ooh3j=mb3d+c3h6ooh2-1           2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp6ooh2j=mp2d+c2h4+oh+ch3hco 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp5ooh7j=c2h4+mpe5*o+oh      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp5ooh3j=mb3d+ethco+oh 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp5ooh2j=mp2d+c4h8+ho2 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp4ooh7j=mpe4d+c2h4+ho2      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp4ooh6j=mb4*o+c3h6+oh       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp4ooh2j=mp2d+nc3h7hco+oh    2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp3ooh7j=mp3*o+oh+c2h4+c2h4  2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp3ooh6j=mb3ooh4j+c3h6       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp3ooh5j=mp3*o+c4h8+oh 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp2ooh6j=mb2ooh4j+c3h6       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp2ooh5j=mp2d+c4h8+ho2 2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhp2ooh4j=me2*o+c5h10+oh      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
!!!!!!
mhp7ooh5j=>mhpcy7o5+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp7ooh4j=>mhpcy7o4+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhp7ooh3j=>mhpcy7o3+oh        1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mhp6ooh4j=>mhpcy6o4+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp6ooh3j=>mhpcy6o3+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhp6ooh2j=>mhpcy6o2+oh        1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mhp5ooh7j=>mhpcy7o5+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp5ooh3j=>mhpcy5o3+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp5ooh2j=>mhpcy5o2+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhp4ooh7j=>mhpcy7o4+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhp4ooh6j=>mhpcy6o4+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp4ooh2j=>mhpcy4o2+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp3ooh7j=>mhpcy7o3+oh        1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mhp3ooh6j=>mhpcy6o3+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhp3ooh5j=>mhpcy5o3+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp2ooh6j=>mhpcy6o2+oh        1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mhp2ooh5j=>mhpcy5o2+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhp2ooh4j=>mhpcy4o2+oh        9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhp2oohmj=>mhpcy2om+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhpmooh2j=>mhpcy2om+oh        3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!!!!!!
mhpcy7o5+h=>mpe5j*o+c2h4+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o5+h=>mhx5d+hco+h2            4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o4+h=>mpe5j4*o+c2h4+h2        2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o4+h=>mpe4d+ch2hco+h2         4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o3+h=>mpe5j3*o+c2h4+h2        2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o3+h=>mb3d+ch2ch2hco+h2       4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o4+h=>mb4j*o+c3h6+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o4+h=>mpe4d+ch3co+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o3+h=>mb4j3*o+c3h6+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o3+h=>mb3d+ch2coch3+h2        2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o2+h=>mp2d+ch3coc2h4p+h2            9.600e+08   1.50  2.005e+03
!25  dbr, see sheet*4
mhpcy5o3+h=>mp3j*o+c4h8+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy5o3+h=>mb3d+c2h5co+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy5o2+h=>mp2d+c2h5coch2+h2       9.600e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhpcy4o2+h=>mp2d+c3h7co+h2          9.600e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhpcy2om+h=>c6h12co+ocho+h2         1.920e+09   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhpcy7o5+oh=>mpe5j*o+c2h4+h2o       1.200e+08   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o5+oh=>mhx5d+hco+h2o          2.400e+08   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o4+oh=>mpe5j4*o+c2h4+h2o      1.200e+08   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o4+oh=>mpe4d+ch2hco+h2o       2.400e+08   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o3+oh=>mpe5j3*o+c2h4+h2o      1.200e+08   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy7o3+oh=>mb3d+ch2ch2hco+h2o           2.400e+08   2.00 -1.192e+03
!25  dbr, see sheet
mhpcy6o4+oh=>mb4j*o+c3h6+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o4+oh=>mpe4d+ch3co+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o3+oh=>mb4j3*o+c3h6+h2o       1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o3+oh=>mb3d+ch2coch3+h2o      1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy6o2+oh=>mp2d+ch3coc2h4p+h2o    4.800e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhpcy5o3+oh=>mp3j*o+c4h8+h2o  1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25  dbr,
see sheet
mhpcy5o3+oh=>mb3d+c2h5co+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhpcy5o2+oh=>mp2d+c2h5coch2+h2o     4.800e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhpcy4o2+oh=>mp2d+c3h7co+h2o        4.800e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhpcy2om+oh=>c6h12co+ocho+h2o       1.760e+07   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
```

```
mhpcy7o5+ho2=>mpe5j*o+c2h4+h2o2     2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy7o5+ho2=>mhx5d+hco+h2o2        4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-po
mhpcy7o4+ho2=>mpe5j4*o+c2h4+h2o2    2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy7o4+ho2=>mpe4d+ch2hco+h2o2     4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-po
mhpcy7o3+ho2=>mpe5j3*o+c2h4+h2o2    2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy7o3+ho2=>mb3d+ch2ch2hco+h2o2   4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-po
mhpcy6o4+ho2=>mb4j*o+c3h6+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy6o4+ho2=>mpe4d+ch3co+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy6o3+ho2=>mb4j3*o+c3h6+h2o2     2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
mhpcy6o3+ho2=>mb3d+ch2coch3+h2o2    2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy6o2+ho2=>mp2d+ch3coc2h4p+h2o2  8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mhpcy5o3+ho2=>mp3j*o+c4h8+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy5o3+ho2=>mb3d+c2h5co+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy5o2+ho2=>mp2d+c2h5coch2+h2o2   8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mhpcy4o2+ho2=>mp2d+c3h7co+h2o2      8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mhpcy2om+ho2=>c6h12co+ocho+h2o2     1.600e+13   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan*4
mhpcy7o5+ch3o=>mpe5j*o+c2h4+ch3oh   1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy7o5+ch3o=>mhx5d+hco+ch3oh      2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy7o4+ch3o=>mpe5j4*o+c2h4+ch3oh  1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy7o4+ch3o=>mpe4d+ch2hco+ch3oh   2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy7o3+ch3o=>mpe5j3*o+c2h4+ch3oh  1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy7o3+ch3o=>mb3d+ch2ch2hco+ch3oh 2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy6o4+ch3o=>mb4j*o+c3h6+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy6o4+ch3o=>mpe4d+ch3co+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c3h6+ch3oh   1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy6o3+ch3o=>mb3d+ch2coch3+ch3oh  1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy6o2+ch3o=>mp2d+ch3coc2h4p+ch3oh      4.380e+11   0.00  5.000e+03
!25  my evans-polyan*4
mhpcy5o3+ch3o=>mp3j*o+c4h8+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy5o3+ch3o=>mb3d+c2h5co+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhpcy5o2+ch3o=>mp2d+c2h5coch2+ch3oh 4.380e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mhpcy4o2+ch3o=>mp2d+c3h7co+ch3oh    4.380e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mhpcy2om+ch3o=>c6h12co+ocho+ch3oh   8.760e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
```

```
mhpcy7o5+ch3o2=>mpe5j*o+c2h4+ch3o2h 2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhpcy7o5+ch3o2=>mhx5d+hco+ch3o2h    4.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy7o4+ch3o2=>mpe5j4*o+c2h4+ch3o2h      2.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-poly
mhpcy7o4+ch3o2=>mpe4d+ch2hco+ch3o2h 4.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mhpcy7o3+ch3o2=>mpe5j3*o+c2h4+ch3o2h      2.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-poly
mhpcy7o3+ch3o2=>mb3d+ch2ch2hco+ch3o2h     4.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan
mhpcy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c3h6+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhpcy6o4+ch3o2=>mpe4d+ch3co+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhpcy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c3h6+ch3o2h 2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhpcy6o3+ch3o2=>mb3d+ch2cooch3+ch3o2h      2.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-poly
mhpcy6o2+ch3o2=>mp2d+ch3coc2h4p+ch3o2h    8.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan*4
mhpcy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c4h8+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhpcy5o3+ch3o2=>mb3d+c2h5co+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhpcy5o2+ch3o2=>mp2d+c2h5coch2+ch3o2h     8.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan*4
mhpcy4o2+ch3o2=>mp2d+c3h7co+ch3o2h  8.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan*4
mhpcy2om+ch3o2=>c6h12co+ocho+ch3o2h 1.600e+13   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan*4
!!!!!!
mhp7ooh6oo=>mhp6ooh7*o+oh           3.300e+09   1.00  3.550e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)
mhp7ooh5oo=>mhp5ooh7*o+oh           5.700e+08   1.00  2.800e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)
mhp7ooh4oo=>mhp4ooh7*o+oh           1.000e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)
mhp7ooh3oo=>mhp3ooh7*o+oh           1.700e+07   1.00  2.400e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 2Hp)
mhp6ooh7oo=>mhp7ooh6*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp6ooh5oo=>mhp5ooh6*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp6ooh4oo=>mhp4ooh6*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhp6ooh3oo=>mhp3ooh6*o+oh           5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mhp6ooh2oo=>mhp2ooh6*o+oh           8.600e+06   1.00  2.100e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Hs)
mhp5ooh7oo=>mhp7ooh5*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhp5ooh6oo=>mhp5ooh6*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp5ooh4oo=>mhp4ooh5*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp5ooh3oo=>mhp3ooh5*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhp5ooh2oo=>mhp2ooh5*o+oh           5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mhp4ooh7oo=>mhp7ooh4*o+oh           5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mhp4ooh6oo=>mhp6ooh4*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
```

```
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhp4ooh5oo=>mhp5ooh4*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp4ooh3oo=>mhp3ooh4*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp4ooh2oo=>mhp2ooh4*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhp3ooh7oo=>mhp7ooh3*o+oh           8.600e+06   1.00  2.100e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Hs)
mhp3ooh6oo=>mhp6ooh3*o+oh           5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mhp3ooh5oo=>mhp5ooh3*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp3ooh4oo=>mhp4ooh3*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp3ooh2oo=>mhp2ooh3*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhp2ooh6oo=>mhp6ooh2*o+oh           8.500e+06   1.00  1.600e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Ht)-
2kcal
mhp2ooh5oo=>mhp5ooh2*o+oh           5.000e+07   1.00  1.700e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)-
2kcal
mhp2ooh4oo=>mhp4ooh2*o+oh           2.850e+07   1.00  2.000e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Ht)-
2kcal
mhp2ooh3oo=>mhp3ooh2*o+oh           1.650e+09   1.00  2.750e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Ht)-
2kcal
mhp2oohmoo=>mhpmooh2*o+oh           5.000e+07   1.00  2.170e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+
2.7poster ECM
mhpmooh2oo=>mhp2oohm*o+oh           1.000e+08   1.00  2.850e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+
3.5poster ECM
!!!!!!
mhp6ooh7*o=>mhx6*o+hco+oh           1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5ooh7*o=>mpe5*o+ch2hco+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5ooh7*o=>mb4j+choch2cho+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4ooh7*o=>mb4*o+ch2ch2hco+oh            1.00e+16   0.00  4.30e+04
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4ooh7*o=>mp3j+choc2h4cho+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh7*o=>mp3*o+c3h6cho-1+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh7*o=>me2j+choc3h6cho+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp7ooh6*o=>mhx6j*o+ch2o+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mhp5ooh6*o=>mpe5*o+ch3co+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4ooh6*o=>mb4*o+ch2cooch3+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4ooh6*o=>mp3j+c4ald3oxo+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh6*o=>mp3*o+ch3coc2h4p+oh           1.00e+16   0.00  4.30e+04
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh6*o=>me2j+c5ald4oxo+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp2ooh6*o=>ch3co2+c6ald5oxo+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
```

```
mhp7ooh5*o=>mhx6j5*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp6ooh5*o=>mpe5j*o+ch3hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4ooh5*o=>mb4*o+c2h5co+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh5*o=>mp3*o+c2h5cooch2+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh5*o=>me2j+c5ald3oxo+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp2ooh5*o=>ch3co2+c6ald4oxo+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp7ooh4*o=>mhx6j4*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp6ooh4*o=>mpe5j4*o+ch3hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5ooh4*o=>mpe5*o4*o+c2h5+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5ooh4*o=>mb4j*o+ethco+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh4*o=>mp3*o+c3h7co+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp2ooh4*o=>ch3co2+c6ald3oxo+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp7ooh3*o=>mhx6j3*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp6ooh3*o=>mpe5j3*o+ch3hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5ooh3*o=>mb4j3*o+ethco+oh  1.00e+16   0.00  4.30e+04   !Curran et
al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4ooh3*o=>mp3j*o+nc3h7hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp2ooh3*o=>ch3co2+c4h9cocho+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp6ooh2*o=>mpe5j2*o+ch3hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp5ooh2*o=>mb4j2*o+ethco+oh  1.00e+16   0.00  4.30e+04   !Curran et
al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp4ooh2*o=>mp3j2*o+nc3h7hco+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhp3ooh2*o=>me2j*o+nc4h9hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhpmooh2*o=>hpaoj2*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mhp2oohm*o=>chooco+c5h11hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!!!!!
mhp6d+o=mhp6d5j+oh                  8.800E+10   0.7    3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+o=mhp6d2j+oh                  8.800E+10   0.7    3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+h= mhp6d5j+h2                 5.400E+04   2.5   -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+h=mhp6d2j+h2                  5.400E+04   2.5   -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+oh=mhp6d5j+h2o                3.000E+06   2.0   -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+oh=mhp6d2j+h2o                3.000E+06   2.0   -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+ho2=mhp6d5j+h2o2              6.400E+03   2.6    1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+ho2=mhp6d2j+h2o2              6.400E+03   2.6    1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)
mhp6d+ch3o=mhp6d5j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
```

```
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp6d+ch3o=mhp6d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp6d+oh=ch3+mhx6*o                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp6d+oh=mhx6j+ch2o                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp6d                =   me2j +   c5h915         2.500E+16  0.0
68000.0 !
mhp6d                =   mp3j +   c4h7           1.000E+16  0.0
71000.0 !
mhp6d                =   mb4j +   ac3h5         1.000E+16  0.0
71000.0 !
c2h3    +   mpe5j    =   mhp6d                   1.000E+13   0.0
0.0 !
mhp6d  +     o2      = mhp6d5j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhp6d  +     o2      = mhp6d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2d+ho2
!mhp6d  +     ch3     = mhp6d5j +     ch4         2.000E+11   0.0
6800.0 !(WESTB.87)
!mhp6d  +     ch3     = mhp6d2j +     ch4         2.000E+11   0.0
6800.0 !(WESTB.87)
mhp6d  +      o      = mhx6j  +     hco          1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp6d5j +      h     = mhp6d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhp6d2j +      h     = mhp6d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhp6d5j              =  mp3j +    c4h6           1.300e+13   0.00
3.590e+04   !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(Rs+1,3-diene)
mhp6d2j              =  mp2d +   c4h7            1.300e+13   0.00
3.590e+04   !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(Rs+1,3-diene)
c6h10co+ch3o=mhp6d2j                5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp5d+o=mhp6d5j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+o=mhp5d4j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+o=mhp5d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h=mhp6d5j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h=mhp5d4j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h=mhp5d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+oh=mhp6d5j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+oh=mhp5d4j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+oh=mhp5d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+ho2=mhp6d5j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+ho2=mhp5d4j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+ho2=mhp5d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+ch3o=mhp6d5j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
```

```
mhp5d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp5d+ch3o=mhp5d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp5d+oh=ch3hco+mpe5j              1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp5d+oh=c2h5+mpe5*o               1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp5d  +      o2      = mhp5d4j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhp5d  +      o2      = mhp5d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mhp5d  +     ch3     = mhp5d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mhp5d  +     ch3     = mhp5d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mhp5d  +      o      = mpe5j  +    ch3co         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp5d4j +      h     = mhp5d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhp5d2j +      h     = mhp5d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhp5d4j=c5h8-13+me2j                1.300e+13   0.00  3.590e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-
diene)
mhp5d2j=c4h7+mp2d                   1.300e+13   0.00  3.590e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-
diene)
c6h10co+ch3o=mhp5d2j                5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp4d+o=mhp5d4j+oh                  1.740e+11   0.70  5.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+o=mhp4d3j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+o=mhp4d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+h=mhp5d4j+h2                  1.740e+05   2.50  2.510e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+h=mhp4d3j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+h=mhp4d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+oh=mhp5d4j+h2o                3.000e+06   2.00 -2.980e+02   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+oh=mhp4d3j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+oh=mhp4d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+ho2=mhp5d4j+h2o2              9.600e+03   2.60  1.390e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+ho2=mhp4d3j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+ho2=mhp4d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh            1.980e+12   0.00  4.000e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (3Hp ally)
mhp4d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp4d+ch3o=mhp4d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp4d+oh=ethco+mb4j                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
```

```
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp4d+oh=nc3h7+mb4*o               1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp4d  +     o2      = mhp5d4j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhp4d  +     o2      = mhp4d3j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhp4d  +     o2      = mhp4d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mhp4d  +     ch3     = mhp5d4j +     ch4         2.210E+00   3.5
5670.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp
ally)
!mhp4d  +     ch3     = mhp4d3j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mhp4d  +     ch3     = mhp4d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mhp4d  +      o      = mb4j  +  c2h5co           1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp4d3j +      h     = mhp4d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RT1)
mhp4d3j=c6h10-13+ch3co2             1.300e+13   0.00  3.390e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rt+1,3-
diene)! A reprendre
mhp4d2j=mp2d+c4h7                   1.300e+13   0.00  5.000e+04   !
c6h10co+ch3o=mhp4d2j                5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp3d+o=mhp4d3j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+o=mhp3d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+h=mhp4d3j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+h=mhp3d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+oh=mhp4d3j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+oh=mhp3d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+ho2=mhp4d3j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+ho2=mhp3d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp3d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp3d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp3d+oh=nc3h7hco+mp3j             1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp3d+oh=pc4h9+mp3*o               1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp3d  +     o2      = mhp4d3j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhp3d  +     o2      = mhp3d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mhp3d  +     ch3     = mhp4d3j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mhp3d  +     ch3     = mhp3d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mhp3d  +      o      = mp3j  +  c3h7co           1.000E+11   0.0   -
```

```
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp3d2j +      h     = mhp3d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhp3d2j=mpe4d2d+c2h5                2.000e+13   0.00  1.500e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(R+cetone/aldehyde)
c6h10co+ch3o=mhp3d2j                5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp2d+o=mhp3d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp2d+h=mhp3d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp2d+oh=mhp3d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp2d+ho2=mhp3d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhp2d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp2d  +     o2      = mhp3d2j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
!mhp2d  +     ch3     = mhp3d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mhp2d  +      o      = me2j  +   nc4h9co         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
!mhp2d+oh=nc4h9hco+me2j             1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp2d+oh=Ac5h11+me2*o              1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!!!!!!
mhp6d+oh=mhp6oh7j             2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mhp5d+oh=mhp5oh6j             2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mhp4d+oh=mhp4oh5j             2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mhp3d+oh=mhp3oh4j             2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mhp2d+oh=mhp2oh3j             2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7  pitz
propene oh
mhp6oh7j+o2=mhp6oh7oo         1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mhp5oh6j+o2=mhp5oh6oo         1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mhp4oh5j+o2=mhp4oh5oo         1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mhp3oh4j+o2=mhp3oh4oo         1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mhp2oh3j+o2=mhp2oh3oo         1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7  pitz
propene oh
mhp6oh7oo=>mhx6*o+oh+ch2o     1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mhp5oh6oo=>mpe5*o+oh+ch3hco   1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mhp4oh5oo=>mb4*o+oh+ethco     1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mhp3oh4oo=>mp3*o+oh+nc3h7hco  1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mhp2oh3oo=>me2*o+oh+nc4h9hco  1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
!!!!!!
hco+mhx6j=mhp7*o              1.000e+13   0.00  0.000e+00   !9
ALLARA and shaw
```

```
mhp7*o+o2=mhp7j*o+ho2         2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
mhp7*o+h=mhp7j*o+h2           4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
mhp7*o+oh=mhp7j*o+h2o         2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
mhp7*o+o=mhp7j*o+oh           5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mhp7*o+ho2=mhp7j*o+h2o2       2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
mhp7j*o=mhx6j+co              1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mhp7j6*o=>ch2co+mpe5j         1.000e+13   0.00  2.800e+04   !Sato et
al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
c2h4+mpe5j*o=mhp7j5*o         2.110e+11   0.00  7.350e+03   !3
anc7:ch3co+c2h4
hco+mhx6j5*o=mhp7*o5*o        1.000e+13   0.00  0.000e+00
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!Methylhexanoate!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
mhx=mhx6j+h                   7.900e+15   0.0   9.797e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx=mhx5j+h                   5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx=mhx4j+h                   5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx=mhx3j+h                   5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx2j+h=mhx                   1.000e+14   0.0   0.0         !1  rnc7
*: h +fragm
mhx=mhxmj+h                   7.900e+15   0.0   9.397e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608 (-4kcal prox O)
mhx=mpe5j+ch3                 5.000e+16   0.0   8.466e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx=mb4j+c2h5                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx=mp3j+nc3h7                7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx=me2j+pc4h9                7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mhx=ch3co2+Ac5h11       1.130e+16   0.0   7.770e+04   !asCH3COCH3
Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311 (-4kcal prox O)
c5h11co+ch3o=mhx              1.500e+13   0.0   0.0         !asDMC
Glaude et al., Proc.Combust.Inst. 31 (2005) 1111-1118
mhx=hxaoj+ch3                 3.160e+16   0.0   8.307e+04   !asDME
Batt et al., Proc. Combust. Inst. 19 (1982) 81-87
!!!!!!
mhx+o2=mhx6j+ho2              2.000e+13   0.0   5.087e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-951
mhx+o2=mhx5j+ho2              4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-951
mhx+o2=mhx4j+ho2              4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-951
mhx+o2=mhx3j+ho2              4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-951
mhx+o2=mhx2j+ho2              4.000e+13   0.0   3.800e+04   !
Estimated
mhx+o2=mhxmj+ho2              2.050e+13   0.0   4.491e+04   !Dayma et
al., Proc. Combust. Inst.
!!!!!!
mhx+h=mhx6j+h2                9.400e+04   2.75  6.280e+03   !2  anc7,
primary f
mhx+h=mhx5j+h2                1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+h=mhx4j+h2                1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+h=mhx3j+h2                1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+h=mhx2j+h2                5.400e+04   2.5  -1.900e+03   !
mhx+h=mhxmj+h2                1.440e+13   0.0   6.095e+03   !(HELD
94)
mhx+o=mhx6j+oh                9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mhx+o=mhx5j+oh                4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+o=mhx4j+oh                4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+o=mhx3j+oh                4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+o=mhx2j+oh                8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
mhx+o=mhxmj+oh                9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mhx+oh=mhx6j+h2o              5.250e+09   0.97  1.590e+03   !2  rnc7,
primary;
mhx+oh=mhx5j+h2o              4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mhx+oh=mhx4j+h2o              4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mhx+oh=mhx3j+h2o              4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mhx+oh=mhx2j+h2o              3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
mhx+oh=mhxmj+h2o              7.100e+06   1.80 -5.960e+02   !(HELD
98)
mhx+ho2=mhx6j+h2o2            8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2  anc7,
primary f
mhx+ho2=mhx5j+h2o2            5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mhx+ho2=mhx4j+h2o2            5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mhx+ho2=mhx3j+h2o2            5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mhx+ho2=mhx2j+h2o2            6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
mhx+ho2=mhxmj+h2o2            9.640e+10   0.00  1.258e+04   !(TSANG
87)
mhx+hco=mhx6j+ch2o            1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mhx+hco=mhx5j+ch2o            1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mhx+hco=mhx4j+ch2o            1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mhx+hco=mhx3j+ch2o            1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mhx+hco=mhx2j+ch2o            1.140e+09   1.30  1.550e+04   !ST
mhx+hco=mhxmj+ch2o            1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mhx+ch3=mhx6j+ch4             4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mhx+ch3=mhx5j+ch4             2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+ch3=mhx4j+ch4             2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+ch3=mhx3j+ch4             2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+ch3=mhx2j+ch4             1.000e+11   0.00  7.300e+03   !
mhx+ch3=mhxmj+ch4             4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mhx+ch3o=mhx6j+ch3oh          1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mhx+ch3o=mhx5j+ch3oh          1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+ch3o=mhx4j+ch3oh          1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+ch3o=mhx3j+ch3oh          1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mhx+ch3o=mhx2j+ch3oh          3.600e+01   2.95  1.000e+04   !
mhx+ch3o=mhxmj+ch3oh          1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mhx+ch3o2=mhx6j+ch3o2h        8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2
corrected to ag
mhx+ch3o2=mhx5j+ch3o2h        5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mhx+ch3o2=mhx4j+ch3o2h        5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mhx+ch3o2=mhx3j+ch3o2h        5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mhx+ch3o2=mhx2j+ch3o2h        6.400e+03   2.60  1.240e+04   !2  same
as ho2
mhx+ch3o2=mhxmj+ch3o2h        8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2
corrected to ag
mhx+c2h3=mhx6j+c2h4           5.010e+11   0.00  1.800e+04   !2  rnc7,
primary;
mhx+c2h3=mhx5j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mhx+c2h3=mhx4j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mhx+c2h3=mhx3j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mhx+c2h3=mhx2j+c2h4           4.000e+11   0.00  1.430e+04   !2  rnc7
*, tertiary
mhx+c2h3=mhxmj+c2h4           5.010e+11   0.00  1.800e+04   !2  rnc7
**, primary
mhx+c2h5=mhx6j+c2h6           5.010e+10   0.00  1.340e+04   !2  rnc7,
primary;
mhx+c2h5=mhx5j+c2h6           5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mhx+c2h5=mhx4j+c2h6           5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mhx+c2h5=mhx3j+c2h6           5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mhx+c2h5=mhx2j+c2h6           2.200e+00   3.50  4.140e+03   !
mhx+c2h5=mhxmj+c2h6           5.010e+10   0.00  1.340e+04   !2  rnc7
**, primary
mhx+ac3h5=mhx6j+c3h6          1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhx+ac3h5=mhx5j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhx+ac3h5=mhx4j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhx+ac3h5=mhx3j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhx+ac3h5=mhx2j+c3h6          8.000e+01   3.30  1.717e+04   !ST
mhx+ac3h5=mhxmj+c3h6          1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhx+mhx2j=mhx6j+mhx           1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhx+mhx2j=mhx5j+mhx           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhx+mhx2j=mhx4j+mhx           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhx+mhx2j=mhx3j+mhx           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mhx+mhx2j=mhxmj+mhx           1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mhx+mhx6oo=mhx6j+mhx6ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx6oo=mhx5j+mhx6ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx6oo=mhx4j+mhx6ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx6oo=mhx3j+mhx6ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx6oo=mhx2j+mhx6ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhx+mhx6oo=mhxmj+mhx6ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx5oo=mhx6j+mhx5ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx5oo=mhx5j+mhx5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx5oo=mhx4j+mhx5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx5oo=mhx3j+mhx5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx5oo=mhx2j+mhx5ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhx+mhx5oo=mhxmj+mhx5ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx4oo=mhx6j+mhx4ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx4oo=mhx5j+mhx4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx4oo=mhx4j+mhx4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx4oo=mhx3j+mhx4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx4oo=mhx2j+mhx4ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhx+mhx4oo=mhxmj+mhx4ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx3oo=mhx6j+mhx3ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx3oo=mhx5j+mhx3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx3oo=mhx4j+mhx3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx3oo=mhx3j+mhx3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx3oo=mhx2j+mhx3ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhx+mhx3oo=mhxmj+mhx3ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx2oo=mhx6j+mhx2ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx2oo=mhx5j+mhx2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx2oo=mhx4j+mhx2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx2oo=mhx3j+mhx2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhx2oo=mhx2j+mhx2ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhx+mhx2oo=mhxmj+mhx2ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhxmoo=mhx6j+mhxmooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhxmoo=mhx5j+mhxmooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhxmoo=mhx4j+mhxmooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhxmoo=mhx3j+mhxmooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
mhx+mhxmoo=mhx2j+mhxmooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
mhx+mhxmoo=mhxmj+mhxmooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!!!!!!
```

```
!mhx6j+o2=mhx6oo              9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!mhx5j+o2=mhx5oo              1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!mhx4j+o2=mhx4oo              1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!mhx3j+o2=mhx3oo              1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
!mhx2j+o2=mhx2oo              1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!mhxmj+o2=mhxmoo              4.500e+12   0.00        0.0   !10  nc7;
primary
!mhxmj+o2=mhxmoo              3.500E+11   0.0     -1700.0   !Dagaut
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001) 61-84
mhx6ooh5j+o2=mhx6ooh5oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhx6ooh4j+o2=mhx6ooh4oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhx6ooh3j+o2=mhx6ooh3oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhx6ooh2j+o2=mhx6ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhx5ooh6j+o2=mhx5ooh6oo       1.500e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
mhx5ooh4j+o2=mhx5ooh4oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhx5ooh3j+o2=mhx5ooh3oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhx5ooh2j+o2=mhx5ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhx4ooh6j+o2=mhx4ooh6oo       9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhx4ooh5j+o2=mhx4ooh5oo       9.500e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
mhx4ooh3j+o2=mhx4ooh3oo       3.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2kt)
mhx4ooh2j+o2=mhx4ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhx3ooh6j+o2=mhx3ooh6oo       9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhx3ooh5j+o2=mhx3ooh5oo       1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
mhx3ooh4j+o2=mhx3ooh4oo       1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
mhx3ooh2j+o2=mhx3ooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
mhx2ooh6j+o2=mhx2ooh6oo       9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhx2ooh5j+o2=mhx2ooh5oo       1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
mhx2ooh4j+o2=mhx2ooh4oo       1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
mhx2ooh3j+o2=mhx2ooh3oo       1.000e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kq)
mhx2oohmj+o2=mhx2oohmoo       3.500E+11   0.0     -1700.0   !Dagaut
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001) 61-84
mhxmooh2j+o2=mhxmooh2oo       1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!!!!!!
mhx6j=mhx3j                   9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhx3j=mhxmj                   2.500e+07   1.00  1.450e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mhx2j=mhx6j                   2.500e+07   1.00  1.450e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mhx2j=mhx5j                   9.900e+07   1.00  1.730e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhx2j=mhxmj                   1.500e+08   1.00  2.280e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 3Hp)+3kcal
mhxmj=mhx4j                   2.900e+06   1.00  1.740e+04   !Glaude
```

```
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mhx6oo=mhx6ooh5j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhx6oo=mhx6ooh4j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhx6oo=mhx6ooh3j              1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mhx6oo=mhx6ooh2j              1.700e+07   1.00  1.600e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 2Ht)-2kcal
mhx5oo=mhx5ooh6j              4.950e+09   1.00  3.550e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 3Hp)
mhx5oo=mhx5ooh4j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhx5oo=mhx5ooh3j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mhx5oo=mhx5ooh2j             1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
!mhx5oo=mhx5ooh2j             1.000e+08   1.00  1.950e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs ally)
mhx5oo=mhx5ooh2j              1.000e+08   1.00  1.700e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)-2kcal
mhx4oo=mhx4ooh6j              8.550e+08   1.00  2.800e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mhx4oo=mhx4ooh5j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
mhx4oo=mhx4ooh3j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhx4oo=mhx4ooh2j             5.700e+08   1.00  2.550e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mhx4oo=mhx4ooh2j             5.700e+08   1.00  2.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs ally)
mhx4oo=mhx4ooh2j              5.700e+08   1.00  1.800e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Ht)-2kcal
mhx3oo=mhx3ooh6j              1.500e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)
mhx3oo=mhx3ooh5j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhx3oo=mhx3ooh4j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhx3oo=mhx3ooh2j             3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhx3oo=mhx3ooh2j             3.300e+09   1.00  3.000e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs ally)
mhx3oo=mhx3ooh2j              3.300e+09   1.00  2.750e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Ht)-2kcal
!mhx3oo=mhx3ooh2j             2.837e+12   0.00  2.779e+04   !12
paper rs values
mhx2oo=mhx2ooh6j              2.500e+07   1.00  2.400e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 8 + 3Hp)
mhx2oo=mhx2ooh5j              1.000e+08   1.00  2.200e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
mhx2oo=mhx2ooh4j              5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
mhx2oo=mhx2ooh3j              3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mhx2oo=mhx2ooh3j             1.088e+12   0.00  2.921e+04   !12
paper rs values
mhx2oo=mhx2oohmj              1.500e+08   1.00  2.850e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+3.5poster
ECM
mhxmoo=mhxmooh2j              1.000e+08   1.00  2.170e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+2.7poster
ECM
mhx6ooh5oo=>mhx5ooh6oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
```

```
in ro2 isome
mhx5ooh6oo=>mhx6ooh5oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhx5ooh4oo=>mhx4ooh5oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhx4ooh5oo=>mhx5ooh4oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhx4ooh3oo=>mhx3ooh4oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhx3ooh4oo=>mhx4ooh3oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhx3ooh2oo=>mhx2ooh3oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
mhx2ooh3oo=>mhx3ooh2oo        7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!!!!!!
mhx6j=c2h4+mb4j               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhx5j=c3h6+mp3j               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhx4j=c4h8+me2j               2.000e+13   0.00  2.470e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (-4kcal)
mhx4j=ch3+mpe4d               2.000e+13   0.00  3.100e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhx3j=c5h10+ch3co2            2.000e+13   0.00  3.050e+04   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (-4kcal)
mhx3j=c2h5+mb3d               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhx2j=nc3h7+mp2d              2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
c5h10co+ch3o=mhx2j            5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
;oh+c3h6=c
mhxmj=ch2o+c5h11co            1.640e+22  -2.33  3.195e+04   !Dooley
et al., Combust. Flame, 153 (2008) 2-32
co2+Ac5h11=hxaoj              1.000e+11   0.00  3.936e+04   !3  since
reaction
mhx6j=h+mhx5d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhx5j=h+mhx5d                 3.000e+13   0.00  3.900e+04   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (3Hp)
mhx5j=h+mhx4d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhx4j=h+mhx4d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhx4j=h+mhx3d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhx3j=h+mhx3d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mhx3j=h+mhx2d                 3.200e+13   0.00  3.480e+04   !Touchard
(2005) Th?se INPL (2Hs ally)
mhx2j=h+mhx2d                 3.000e+13   0.00  5.000e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
!!!!!!
mhx6j+o2=mhx5d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhx5j+o2=mhx5d+ho2            8.070e+11   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhx5j+o2=mhx4d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhx4j+o2=mhx4d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhx4j+o2=mhx3d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhx3j+o2=mhx3d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
```

```
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mhx3j+o2=mhx2d+ho2            2.600e+11   0.00  2.500e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
mhx2j+o2=mhx2d+ho2            1.580e+12   0.00  1.520e+04   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
!!!!!!
mhx6oo+mhx6oo=>mhx6o+mhx6o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx6oo+mhx5oo=>mhx6o+mhx5o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx6oo+mhx4oo=>mhx6o+mhx4o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx6oo+mhx3oo=>mhx6o+mhx3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx6oo+mhx2oo=>mhx6o+mhx2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx6oo+mhxmoo=>mhx6o+mhxmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx5oo+mhx5oo=>mhx5o+mhx5o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx5oo+mhx4oo=>mhx5o+mhx4o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx5oo+mhx3oo=>mhx5o+mhx3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx5oo+mhx2oo=>mhx5o+mhx2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx5oo+mhxmoo=>mhx5o+mhxmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx4oo+mhx4oo=>mhx4o+mhx4o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx4oo+mhx3oo=>mhx4o+mhx3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx4oo+mhx2oo=>mhx4o+mhx2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx4oo+mhxmoo=>mhx4o+mhxmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx3oo+mhx3oo=>mhx3o+mhx3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx3oo+mhx2oo=>mhx3o+mhx2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx3oo+mhxmoo=>mhx3o+mhxmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx2oo+mhx2oo=>mhx2o+mhx2o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx2oo+mhxmoo=>mhx2o+mhxmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhxmoo+mhxmoo=>mhxmo+mhxmo+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
mhx6oo+ch3o2=>mhx6o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhx5oo+ch3o2=>mhx5o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhx4oo+ch3o2=>mhx4o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhx3oo+ch3o2=>mhx3o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhx2oo+ch3o2=>mhx2o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
mhxmoo+ch3o2=>mhxmo+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!!!!!!
mhx6oo+ho2=mhx6ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhx5oo+ho2=mhx5ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhx4oo+ho2=mhx4ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhx3oo+ho2=mhx3ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhx2oo+ho2=mhx2ooh+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
```

```
et al., 2001
mhxmoo+ho2=mhxmooh+o2          2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
mhx6oo+h2o2=>mhx6ooh+ho2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx6ooh+ho2=>mhx6oo+h2o2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx5oo+h2o2=>mhx5ooh+ho2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx5ooh+ho2=>mhx5oo+h2o2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx4oo+h2o2=>mhx4ooh+ho2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx4ooh+ho2=>mhx4oo+h2o2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx3oo+h2o2=>mhx3ooh+ho2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx3ooh+ho2=>mhx3oo+h2o2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx2oo+h2o2=>mhx2ooh+ho2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhx2ooh+ho2=>mhx2oo+h2o2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhxmoo+h2o2=>mhxmooh+ho2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
mhxmooh+ho2=>mhxmoo+h2o2       2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!!!!!!
mhx6oo+mhx6j=mhx6o+mhx6o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx6oo+mhx5j=mhx6o+mhx5o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx6oo+mhx4j=mhx6o+mhx4o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx6oo+mhx3j=mhx6o+mhx3o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx6oo+mhx2j=mhx6o+mhx2o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx6oo+mhxmj=mhx6o+mhxmo       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx5oo+mhx5j=mhx5o+mhx5o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx5oo+mhx4j=mhx5o+mhx4o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx5oo+mhx3j=mhx5o+mhx3o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx5oo+mhx2j=mhx5o+mhx2o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx5oo+mhxmj=mhx5o+mhxmo       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx4oo+mhx4j=mhx4o+mhx4o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx4oo+mhx3j=mhx4o+mhx3o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx4oo+mhx2j=mhx4o+mhx2o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx4oo+mhxmj=mhx4o+mhxmo       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx3oo+mhx3j=mhx3o+mhx3o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx3oo+mhx2j=mhx3o+mhx2o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx3oo+mhxmj=mhx3o+mhxmo       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx2oo+mhx2j=mhx2o+mhx2o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx2oo+mhxmj=mhx2o+mhxmo       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhxmoo+mhxmj=mhxmo+mhxmo       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhx6j=oh+mhx6o             7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhx5j=oh+mhx5o             7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhx4j=oh+mhx4o             7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhx3j=oh+mhx3o             7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhx2j=oh+mhx2o             7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ho2+mhxmj=oh+mhxmo             7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx6oo+ch3=mhx6o+ch3o          7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx5oo+ch3=mhx5o+ch3o          7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx4oo+ch3=mhx4o+ch3o          7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx3oo+ch3=mhx3o+ch3o          7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhx2oo+ch3=mhx2o+ch3o          7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
mhxmoo+ch3=mhxmo+ch3o          7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhx6j=ch3o+mhx6o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhx5j=ch3o+mhx5o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhx4j=ch3o+mhx4o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhx3j=ch3o+mhx3o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhx2j=ch3o+mhx2o         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
ch3o2+mhxmj=ch3o+mhxmo         7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!!!!!!
mhx6ooh=mhx6o+oh               1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mhx5ooh=mhx5o+oh               9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mhx4ooh=mhx4o+oh               9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mhx3ooh=mhx3o+oh               9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
mhx2ooh=mhx2o+oh               5.950e+15   0.00  4.254e+04   !17  anc,
tertiary s
mhxmooh=mhxmo+oh               1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
ch2o+mpe5j=mhx6o               1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch3hco+mb4j=mhx5o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch3+mpe5*o=mhx5o               1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ethco+mp3j=mhx4o        1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18  anc7, alk
to te
c2h5+mb4*o=mhx4o               1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc3h7hco+me2j=mhx3o            1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc3h7+mp3*o=mhx3o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc4h9hco+ch3co2=mhx2o          1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
pc4h9+me2*o=mhx2o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch2o+hxaoj=mhxmo               1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mhx6*o+h=mhx6o                 6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
mhxm*o+h=mhxmo                 6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
!!!!!!
mhx5d+ho2=mhx6ooh5j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx5d+ho2=mhx5ooh6j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx4d+ho2=mhx5ooh4j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx4d+ho2=mhx4ooh5j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3d+ho2=mhx4ooh3j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3d+ho2=mhx3ooh4j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx2d+ho2=mhx3ooh2j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx2d+ho2=mhx2ooh3j            1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx6ooh4j=>mpe4d+ch2o+oh       2.000e+13   0.00  3.100e+04   !
mhx6ooh3j=>mb3d+c2h4o2h        2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx6ooh2j=>mp2d+c3h6ooh1-3     2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx5ooh3j=>mb3d+ch3hco+oh      2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx5ooh2j=>mp2d+c3h6+ho2       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx4ooh6j=>mb4*o+c2h4+oh       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx4ooh2j=>mp2d+ethco+oh       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx3ooh6j=>mb3d+c2h4+ho2       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx3ooh5j=>mp3*o+c3h6+oh       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx2ooh6j=>mb2ooh4j+c2h4       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx2ooh5j=>mp2d+c3h6+ho2       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
mhx2ooh4j=>me2*o+c4h8+oh       2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
!!!!!!
mhx6ooh4j=>mhxcy6o4+oh         9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhx6ooh3j=>mhxcy6o3+oh         3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhx6ooh2j=>mhxcy6o2+oh         1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mhx5ooh3j=>mhxcy5o3+oh         9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhx5ooh2j=>mhxcy5o2+oh         3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhx4ooh6j=>mhxcy6o4+oh         9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhx4ooh2j=>mhxcy4o2+oh         9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhx3ooh6j=>mhxcy6o3+oh         3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhx3ooh5j=>mhxcy5o3+oh         9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhx2ooh6j=>mhxcy6o2+oh         1.700e+08   0.00  1.950e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
mhx2ooh5j=>mhxcy5o2+oh         3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhx2ooh4j=>mhxcy4o2+oh         9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
mhx2oohmj=>mhxcy2om+oh         3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
mhxmooh2j=>mhxcy2om+oh         3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!!!!!!
mhxcy6o4+h=>mb4j*o+c2h4+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o4+h=>mpe4d+hco+h2            4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o3+h=>mb4j3*o+c2h4+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o3+h=>mb3d+ch2hco+h2          4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o2+h=>mp2d+ch2ch2hco+h2       9.600e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhxcy5o3+h=>mp3j*o+c3h6+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy5o3+h=>mb3d+ch3co+h2           2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy5o2+h=>mp2d+ch2coch3+h2        9.600e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhxcy4o2+h=>mp2d+c2h5co+h2          9.600e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhxcy2om+h=>c5h10co+ocho+h2         1.920e+09   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhxcy6o4+oh=>mb4j*o+c2h4+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o4+oh=>mpe4d+hco+h2o          2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o3+oh=>mb4j3*o+c2h4+h2o       1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o3+oh=>mb3d+ch2hco+h2o        2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy6o2+oh=>mp2d+ch2ch2hco+h2o           4.800e+06   2.00 -1.192e+03
!25  dbr, see sheet*4
mhxcy5o3+oh=>mp3j*o+c3h6+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy5o3+oh=>mb3d+ch3co+h2o         1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
mhxcy5o2+oh=>mp2d+ch2coch3+h2o      4.800e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhxcy4o2+oh=>mp2d+c2h5co+h2o        4.800e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhxcy2om+oh=>c5h10co+ocho+h2o       9.600e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet*4
mhxcy6o4+ho2=>mb4j*o+c2h4+h2o2      2.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan
mhxcy6o4+ho2=>mpe4d+hco+h2o2        4.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhxcy6o3+ho2=>mb4j3*o+c2h4+h2o2     2.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-poly
mhxcy6o3+ho2=>mb3d+ch2hco+h2o2      4.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhxcy6o2+ho2=>mp2d+ch2ch2hco+h2o2   1.000e+13   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mhxcy5o3+ho2=>mp3j*o+c3h6+h2o2      2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhxcy5o3+ho2=>mb3d+ch3co+h2o2       2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
mhxcy5o2+ho2=>mp2d+ch2coch3+h2o2    8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mhxcy4o2+ho2=>mp2d+c2h5co+h2o2      8.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan*4
mhxcy2om+ho2=>c5h10co+ocho+h2o2     1.600e+13   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan*4
mhxcy6o4+ch3o=>mb4j*o+c2h4+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhxcy6o4+ch3o=>mpe4d+hco+ch3oh      2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhxcy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c2h4+ch3oh   1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhxcy6o3+ch3o=>mb3d+ch2hco+ch3oh    2.190e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhxcy6o2+ch3o=>mp2d+ch2ch2hco+ch3oh 4.380e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mhxcy5o3+ch3o=>mp3j*o+c3h6+ch3oh    1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhxcy5o3+ch3o=>mb3d+ch3co+ch3oh     1.095e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan
mhxcy5o2+ch3o=>mp2d+ch2coch3+ch3oh  4.380e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mhxcy4o2+ch3o=>mp2d+c2h5co+ch3oh    4.380e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mhxcy2om+ch3o=>c5h10co+ocho+ch3oh   8.760e+11   0.00  5.000e+03   !25
my evans-polyan*4
mhxcy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c2h4+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhxcy6o4+ch3o2=>mpe4d+hco+ch3o2h    4.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mhxcy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c2h4+ch3o2h 2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhxcy6o3+ch3o2=>mb3d+ch2hco+ch3o2h  4.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan
mhxcy6o2+ch3o2=>mp2d+ch2ch2hco+ch3o2h     8.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan*4
mhxcy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c3h6+ch3o2h  2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-poly
mhxcy5o3+ch3o2=>mb3d+ch3co+ch3o2h   2.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
```

```
my evans-poly
mhxcy5o2+ch3o2=>mp2d+ch2cooch3+ch3o2h      8.000e+12   0.00  1.770e+04
!25  my evans-polyan*4
mhxcy4o2+ch3o2=>mp2d+c2h5co+ch3o2h  8.000e+12   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan*4
mhxcy2om+ch3o2=>c5h10co+ochо+ch3o2h 1.600e+13   0.00  1.770e+04   !25
my evans-polyan*4
!!!!!!
mhx6ooh5oo=>mhx5ooh6*o+oh           3.300e+09   1.00  3.550e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)
mhx6ooh4oo=>mhx4ooh6*o+oh           5.700e+08   1.00  2.800e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)
mhx6ooh3oo=>mhx3ooh6*o+oh           1.000e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)
mhx6ooh2oo=>mhx2ooh6*o+oh           1.700e+07   1.00  2.400e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 2Hp)
mhx5ooh6oo=>mhx5ooh6*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhx5ooh4oo=>mhx4ooh5*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhx5ooh3oo=>mhx3ooh5*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhx5ooh2oo=>mhx2ooh5*o+oh           5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mhx4ooh6oo=>mhx6ooh4*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhx4ooh5oo=>mhx5ooh4*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhx4ooh3oo=>mhx3ooh4*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhx4ooh2oo=>mhx2ooh4*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhx3ooh6oo=>mhx6ooh3*o+oh           5.000e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)
mhx3ooh5oo=>mhx5ooh3*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
mhx3ooh4oo=>mhx4ooh3*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhx3ooh2oo=>mhx2ooh3*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
mhx2ooh6oo=>mhx6ooh2*o+oh           8.500e+06   1.00  1.600e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Ht)-
2kcal
mhx2ooh5oo=>mhx5ooh2*o+oh           5.000e+07   1.00  1.700e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)-
2kcal
mhx2ooh4oo=>mhx4ooh2*o+oh           2.850e+07   1.00  2.000e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Ht)-
2kcal
mhx2ooh3oo=>mhx3ooh2*o+oh           1.650e+09   1.00  2.750e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Ht)-
2kcal
mhx2oohmoo=>mhxmooh2*o+oh           5.000e+07   1.00  2.170e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+
2.7poster ECM
mhxmooh2oo=>mhx2oohm*o+oh           1.000e+08   1.00  2.850e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+
3.5poster ECM
!!!!!!
mhx5ooh6*o=>mpe5*o+hco+oh           1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx4ooh6*o=>mb4*o+ch2hco+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3ooh6*o=>me2j+choc2h4cho+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx2ooh6*o=>ch3co2+choc3h6cho+oh    1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx6ooh5*o=>mpe5j*o+ch2o+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mhx4ooh5*o=>mb4*o+ch3co+oh          1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3ooh5*o=>mp3*o+ch2cooch3+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3ooh5*o=>me2j+c4ald3oxo+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx2ooh5*o=>ch3co2+c5ald4oxo+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx6ooh4*o=>mpe5j4*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mhx5ooh4*o=>mb4j*o+ch3hco+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3ooh4*o=>mp3*o+c2h5co+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3ooh4*o=>me2j+c4ald2oxo+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx2ooh4*o=>ch3co2+c5ald3oxo+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx6ooh3*o=>mpe5j3*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mhx5ooh3*o=>mb4j3*o+ch3hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx4ooh3*o=>mp3j*o+ethco+oh         1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx2ooh3*o=>ch3co2+c5ald2oxo+oh     1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx6ooh2*o=>mpe5j2*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx5ooh2*o=>mb4j2*o+ch3hco+oh       1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx4ooh2*o=>mp3j2*o+ethco+oh  1.00e+16   0.00  4.30e+04   !Curran et
al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhx3ooh2*o=>me2j*o+nc3h7hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mhxmooh2*o=>hxaoj2*o+ch2o+oh        1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
mhx2oohm*o=>chooco+nc4h9hco+oh      1.00e+16   0.00  4.30e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!!!!!!
mhx5d+o=mhx5d4j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+o=mhx5d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+h=mhx5d4j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+h=mhx5d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+oh=mhx5d4j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+oh=mhx5d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+ho2=mhx5d4j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+ho2=mhx5d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx5d+ch3o=mhx5d4j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhx5d+ch3o=mhx5d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhx5d+oh=ch2o+mpe5j                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhx5d+oh=ch3+mpe5*o                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhx5d               =   me2j +   c4h7          2.500E+16  0.0
68000.0 !
mhx5d               =   mp3j +   ac3h5        1.000E+16  0.0
71000.0 !
c2h3    +   mb4j     =   mhx5d                  1.000E+13   0.0
0.0 !(30/06/2000)
mhx5d  +     o2      = mhx5d4j +     ho2        4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhx5d  +     o2      = mhx5d2j +     ho2        4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
mhx5d  +      o      = mpe5j  +     hco         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhx5d4j +      h     = mhx5d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhx5d2j +      h     = mhx5d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhx5d4j=c4h6+me2j                   1.300e+13   0.00  3.590e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-
diene)
mhx5d2j=ac3h5+mp2d                  1.300e+13   0.00  3.590e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-
diene)
c5h8co+ch3o=mhx5d2j                 5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhx4d+o=mhx5d4j+oh                  1.740e+11   0.70  5.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhx4d+o=mhx4d3j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+o=mhx4d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+h=mhx5d4j+h2                  1.740e+05   2.50  2.510e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhx4d+h=mhx4d3j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+h=mhx4d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+oh=mhx5d4j+h2o                3.000e+06   2.00 -2.980e+02   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhx4d+oh=mhx4d3j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+oh=mhx4d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+ho2=mhx5d4j+h2o2              9.600e+03   2.60  1.390e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhx4d+ho2=mhx4d3j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+ho2=mhx4d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhx4d+ch3o=mhx5d4j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhx4d+ch3o=mhx4d3j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhx4d+ch3o=mhx4d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhx4d+oh=ch3hco+mb4j               1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhx4d+oh=c2h5+mb4*o                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhx4d  +     o2      = mhx5d4j +     ho2        4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhx4d  +     o2      = mhx4d3j +     ho2        4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhx4d  +     o2      = mhx4d2j +     ho2        4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
mhx4d  +      o      = mb4j  +   ch3co         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhx4d3j +      h     = mhx4d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mhx4d3j=c5h8+ch3co2                 1.300e+13   0.00  3.390e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rt+1,3-
diene)! A reprendre
mhx4d2j=mp2d+ac3h5                  1.300e+13   0.00  5.000e+04   !
c5h8co+ch3o=mhx4d2j                 5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhx3d+o=mhx4d3j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+o=mhx3d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+h=mhx4d3j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+h=mhx3d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+oh=mhx4d3j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+oh=mhx3d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+ho2=mhx4d3j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+ho2=mhx3d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx3d+ch3o=mhx4d3j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhx3d+ch3o=mhx3d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhx3d+oh=ethco+mp3j                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhx3d+oh=nc3h7+mp3*o               1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhx3d  +     o2      = mhx4d3j +     ho2        4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhx3d  +     o2      = mhx3d2j +     ho2        4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
mhx3d  +      o      = mp3j  +   c2h5co         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhx3d2j +      h     = mhx3d                    1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
c5h8co+ch3o=mhx3d2j                 5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhx2d+o=mhx3d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx2d+h=mhx3d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx2d+oh=mhx3d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx2d+ho2=mhx3d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mhx2d+ch3o=mhx3d2j+ch3oh            1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhx2d  +     o2      = mhx3d2j +     ho2        4.000E+12   0.0
37000.0 !
mhx2d  +      o      = me2j  +   c3h7co        1.000E+11   0.0   -
```

```
1050.0 !Mohammed (curran2000)
!mhx2d+oh=nc3h7hco+me2j              1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhx2d+oh=pc4h9+me2*o                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!!!!!!
mhx5d+oh=mhx5oh6j                    2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7
pitz propene oh
mhx4d+oh=mhx4oh5j                    2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7
pitz propene oh
mhx3d+oh=mhx3oh4j                    2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7
pitz propene oh
mhx2d+oh=mhx2oh3j                    2.760e+12   0.00 -1.042e+03   !7
pitz propene oh
mhx5oh6j+o2=mhx5oh6oo                1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7
pitz propene oh
mhx4oh5j+o2=mhx4oh5oo                1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7
pitz propene oh
mhx3oh4j+o2=mhx3oh4oo                1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7
pitz propene oh
mhx2oh3j+o2=mhx2oh3oo                1.000e+12   0.00 -1.100e+03   !7
pitz propene oh
mhx5oh6oo=>mpe5*o+oh+ch2o            1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mhx4oh5oo=>mb4*o+oh+ch3hco           1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mhx3oh4oo=>mp3*o+oh+ethco            1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
mhx2oh3oo=>me2*o+oh+nc3h7hco         1.000e+12   0.00  2.868e+04   !7
irreversible; p
!!!!!!
hco+mpe5j=mhx6*o                     1.000e+13   0.00  0.000e+00   !9
ALLARA and shaw
mhx6*o+o2=mhx6j*o+ho2                2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
mhx6*o+h=mhx6j*o+h2                  4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7: aldehydic
mhx6*o+oh=mhx6j*o+h2o                2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
mhx6*o+o=mhx6j*o+oh                  5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mhx6*o+ho2=mhx6j*o+h2o2              2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
mhx6j*o=>mpe5j+co                    1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
mhx6j5*o=>ch2co+mb4j                 1.000e+13   0.00  2.800e+04   !
Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
hco+mpe5j4*o=mhx6*o4*o               1.000e+13   0.00  0.000e+00
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!Methylpentanoate!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
mpe=mpe5j+h                    7.900e+15   0.0   9.797e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mpe=mpe4j+h                    5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mpe=mpe3j+h                    5.000e+15   0.0   9.499e+04   !as s-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mpe2j+h=mpe                    1.000e+14   0.0   0.0         !1  rnc7
*: h +fragm
mpe=mpemj+h                    7.900e+15   0.0   9.397e+04   !as n-
C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608 (-4kcal prox O)
mpe=mb4j+ch3                   5.000e+16   0.0   8.466e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mpe=mp3j+c2h5                  7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mpe=me2j+nc3h7                 7.940e+16   0.0   8.028e+04   !asC4H10
Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
mpe=ch3co2+pc4h9               1.130e+16   0.0   7.770e+04   !as Sato
et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311 (-4kcal prox O)
nc4h9co+ch3o=mpe               1.500e+13   0.0   0.0         !asDMC
Glaude et al., Proc.Combust.Inst. 31 (2005) 1111-1118
mpe=peaoj+ch3                  3.160e+16   0.0   8.307e+04   !asDME
Batt et al., Proc. Combust. Inst. 19 (1982) 81-87
!!!!!!
mpe+o2=mpe5j+ho2               2.000e+13   0.0   5.087e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mpe+o2=mpe4j+ho2               4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mpe+o2=mpe3j+ho2               4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et
al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mpe+o2=mpe2j+ho2               4.000e+13   0.0   3.730e+04   !
Estimated
mpe+o2=mpemj+ho2               2.050e+13   0.0   4.491e+04   !Dayma et
al., Proc. Combust. Inst.
!!!!!!
mpe+h=mpe5j+h2                 9.400e+04   2.75  6.280e+03   !2  anc7,
primary f
mpe+h=mpe4j+h2                 1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+h=mpe3j+h2                 1.300e+06   2.4   4.471e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+h=mpe2j+h2                 5.400e+04   2.5  -1.900e+03   !
mpe+h=mpemj+h2                 1.440e+13   0.0   6.095e+03   !(HELD
94)
mpe+o=mpe5j+oh                 9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mpe+o=mpe4j+oh                 4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+o=mpe3j+oh                 4.770e+04   2.71  2.106e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+o=mpe2j+oh                 8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
mpe+o=mpemj+oh                 9.650e+04   2.68  3.716e+03   !2  anc7,
primary f
mpe+oh=mpe5j+h2o               5.250e+09   0.97  1.590e+03   !2  rnc7,
primary;
mpe+oh=mpe4j+h2o               4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mpe+oh=mpe3j+h2o               4.680e+07   1.61 -3.500e+01   !2  rnc7,
secondary
mpe+oh=mpe2j+h2o               3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
mpe+oh=mpemj+h2o               7.100e+06   1.80 -5.960e+02   !(HELD
98)
mpe+ho2=mpe5j+h2o2             8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2  anc7,
primary f
mpe+ho2=mpe4j+h2o2             5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mpe+ho2=mpe3j+h2o2             5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2  anc7,
secondary
mpe+ho2=mpe2j+h2o2             6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
mpe+ho2=mpemj+h2o2             9.640e+10   0.00  1.258e+04   !(TSANG
87)
mpe+hco=mpe5j+ch2o             1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mpe+hco=mpe4j+ch2o             1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mpe+hco=mpe3j+ch2o             1.080e+07   1.90  1.700e+04   !ST
mpe+hco=mpe2j+ch2o             1.140e+09   1.30  1.550e+04   !ST
mpe+hco=mpemj+ch2o             1.020e+05   2.50  1.850e+04   !ST
mpe+ch3=mpe5j+ch4              4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mpe+ch3=mpe4j+ch4              2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+ch3=mpe3j+ch4              2.705e+04   2.26  7.287e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+ch3=mpe2j+ch4              1.000e+11   0.00  7.300e+03   !
mpe+ch3=mpemj+ch4              4.520e-01   3.65  7.154e+03   !2  anc7,
primary f
mpe+ch3o=mpe5j+ch3oh           1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mpe+ch3o=mpe4j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+ch3o=mpe3j+ch3oh           1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+ch3o=mpe2j+ch3oh           1.780e+12   0.00  1.200e+03   !
mpe+ch3o=mpemj+ch3oh           1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mpe+ch2oh=mpe5j+ch3oh          1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mpe+ch2oh=mpe4j+ch3oh          1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+ch2oh=mpe3j+ch3oh          1.095e+11   0.00  5.000e+03   !2  anc7,
secondary
mpe+ch2oh=mpe2j+ch3oh          3.600e+01   2.95  1.000e+04   !
mpe+ch2oh=mpemj+ch3oh          1.581e+11   0.00  7.000e+03   !2  rnc7,
primary;
mpe+ch3o2=mpe5j+ch3o2h         8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2
corrected to ag
mpe+ch3o2=mpe4j+ch3o2h         5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mpe+ch3o2=mpe3j+ch3o2h         5.600e+12   0.00  1.769e+04   !2
corrected to ag
mpe+ch3o2=mpe2j+ch3o2h         6.400e+03   2.60  1.240e+04   !2  same
as ho2
mpe+ch3o2=mpemj+ch3o2h         8.400e+12   0.00  2.044e+04   !2
corrected to ag
mpe+c2h3=mpe5j+c2h4            5.010e+11   0.00  1.800e+04   !2  rnc7,
primary;
mpe+c2h3=mpe4j+c2h4            4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mpe+c2h3=mpe3j+c2h4            4.000e+11   0.00  1.680e+04   !2  rnc7,
secondary
mpe+c2h3=mpe2j+c2h4            4.000e+11   0.00  1.430e+04   !2  rnc7
*, tertiary
mpe+c2h3=mpemj+c2h4            5.010e+11   0.00  1.800e+04   !2  rnc7
**, primary
mpe+c2h5=mpe5j+c2h6            5.010e+10   0.00  1.340e+04   !2  rnc7,
primary;
mpe+c2h5=mpe4j+c2h6            5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mpe+c2h5=mpe3j+c2h6            5.000e+10   0.00  1.040e+04   !2  rnc7,
secondary
mpe+c2h5=mpe2j+c2h6            2.200e+00   3.50  4.140e+03   !
mpe+c2h5=mpemj+c2h6            5.010e+10   0.00  1.340e+04   !2  rnc7
**, primary
mpe+ac3h5=mpe5j+c3h6           1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mpe+ac3h5=mpe4j+c3h6           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mpe+ac3h5=mpe3j+c3h6           8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mpe+ac3h5=mpe2j+c3h6           8.000e+01   3.30  1.717e+04   !ST
mpe+ac3h5=mpemj+c3h6           1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mpe+mpe2j=mpe5j+mpe            1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
mpe+mpe2j=mpe4j+mpe            8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mpe+mpe2j=mpe3j+mpe            8.000e+01   3.30  1.817e+04   !ST
mpe+mpe2j=mpemj+mpe            1.200e+02   3.30  1.984e+04   !ST
!mpe+mpe5oo=mpe5j+mpe5ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe5oo=mpe4j+mpe5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe5oo=mpe3j+mpe5ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe5oo=mpe2j+mpe5ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
!mpe+mpe5oo=mpemj+mpe5ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe4oo=mpe5j+mpe4ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe4oo=mpe4j+mpe4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe4oo=mpe3j+mpe4ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe4oo=mpe2j+mpe4ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
!mpe+mpe4oo=mpemj+mpe4ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe3oo=mpe5j+mpe3ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe3oo=mpe4j+mpe3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe3oo=mpe3j+mpe3ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe3oo=mpe2j+mpe3ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
!mpe+mpe3oo=mpemj+mpe3ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe2oo=mpe5j+mpe2ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe2oo=mpe4j+mpe2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe2oo=mpe3j+mpe2ooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpe2oo=mpe2j+mpe2ooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
!mpe+mpe2oo=mpemj+mpe2ooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpemoo=mpe5j+mpemooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpemoo=mpe4j+mpemooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpemoo=mpe3j+mpemooh      1.867e+12   0.00  1.769e+04   !2  new
reaction pe
!mpe+mpemoo=mpe2j+mpemooh      1.000e+12   0.00  1.455e+04   !
!mpe+mpemoo=mpemj+mpemooh      2.800e+12   0.00  2.044e+04   !2  new
reaction pe
!!!!!!
!mpe5j+o2=mpe5oo               9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!mpe4j+o2=mpe4oo               1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!mpe3j+o2=mpe3oo               1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
!mpe2j+o2=mpe2oo               1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!mpemj+o2=mpemoo               4.500e+12   0.00  0.000e+00   !10  nc7;
primary
!mpe5ooh4j+o2=mpe5ooh4oo             1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!mpe5ooh3j+o2=mpe5ooh3oo             1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
!mpe5ooh2j+o2=mpe5ooh2oo             1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!mpe4ooh5j+o2=mpe4ooh5oo             1.500e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
!mpe4ooh3j+o2=mpe4ooh3oo             3.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2kt)
!mpe4ooh2j+o2=mpe4ooh2oo             1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
```

```
!mpe3ooh5j+o2=mpe3ooh5oo            9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!mpe3ooh4j+o2=mpe3ooh4oo            9.500e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
!mpe3ooh2j+o2=mpe3ooh2oo            1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!mpe2ooh5j+o2=mpe2ooh5oo            9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!mpe2ooh4j+o2=mpe2ooh4oo            1.700e+19  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!mpe2ooh3j+o2=mpe2ooh3oo            1.000e+19  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kq)
!mpe2oohmj+o2=mpe2oohmoo            4.500e+12   0.00  0.000e+00   !10
nc7; primary
!mpemooh2j+o2=mpemooh2oo            1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
!!!!!!
mpe3j=mpemj                   2.500e+07   1.00  1.450e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
mpe2j=mpe5j                   1.500e+08   1.00  1.980e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 3Hp)
mpe2j=mpemj                   1.500e+08   1.00  1.980e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 5 + 3Hp)
mpemj=mpe4j                   2.900e+06   1.00  1.740e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 2Hs)
!mpe5oo=mpe5ooh4j             3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mpe5oo=mpe5ooh3j             5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mpe5oo=mpe5ooh2j             1.000e+08   1.00  1.950e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs ally)
!mpe4oo=mpe4ooh5j             4.950e+09   1.00  3.550e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 3Hp)
!mpe4oo=mpe4ooh3j             3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mpe4oo=mpe4ooh2j             5.700e+08   1.00  2.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs ally)
!mpe3oo=mpe3ooh5j             8.550e+08   1.00  2.800e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
!mpe3oo=mpe3ooh4j             3.300e+09   1.00  3.250e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
!mpe3oo=mpe3ooh2j             2.837e+12   0.00  2.779e+04   !12
paper rs values
!!mpe3oo=mpe3ooh2j                  3.300e+09   1.00  2.950e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Ht)
!mpe2oo=mpe2ooh5j             1.500e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)
!mpe2oo=mpe2ooh4j             5.700e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
!mpe2oo=mpe2ooh3j             1.088e+12   0.00  2.921e+04   !12
paper rs values
!!mpe2oo=mpe2ooh3j                  3.300e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Ht)
!!mpe2oo=mpe2oohmj                  3.165e+09   0.00  2.180e+04   !12
paper rs values
!mpe2oo=mpe2oohmj             1.500e+08   1.00  2.500e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)
!!mpemoo=mpemooh2j                  1.455e+10   0.00  1.919e+04   !12
paper rs values
!mpemoo=mpemooh2j             1.000e+08   1.00  1.900e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)
!mpe5ooh4oo=>mpe4ooh5oo       7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!mpe4ooh5oo=>mpe5ooh4oo       7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!mpe4ooh3oo=>mpe3ooh4oo       7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
```

```
in ro2 isome
!mpe3ooh4oo=>mpe4ooh3oo       7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!mpe3ooh2oo=>mpe2ooh3oo       7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!mpe2ooh3oo=>mpe3ooh2oo       7.275e+09   0.00  1.270e+04   !23  as
in ro2 isome
!!!!!!
mpe5j=c2h4+mp3j               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mpe4j=c3h6+me2j               2.000e+13   0.00  2.470e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (-4kcal)
mpe3j=c4h8+ch3co2       2.000e+13   0.00  3.050e+04   !Touchard et
al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (-4kcal)
mpe3j=ch3+mb3d                2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mpe2j=c2h5+mp2d               2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
c4h8co+ch3o=mpe2j             5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3  anc7
:oh+c3h6=c
mpemj=ch2o+nc4h9co            1.640e+22  -2.33  3.195e+04   !Dooley
et al., Combust. Flame, 153 (2008) 2-32
!!!!!!!!!!!co2+pc4h9=peaoj                  1.000e+11   0.00  3.936e+04
!3  since reaction
mpe5j=h+mpe4d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mpe4j=h+mpe4d                 3.000e+13   0.00  3.900e+04   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (3Hp)
mpe4j=h+mpe3d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mpe3j=h+mpe3d                 3.000e+13   0.00  3.800e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
mpe3j=h+mpe2d                 3.200e+13   0.00  3.480e+04   !Touchard
(2005) Th?se INPL (2Hs ally)
mpe2j=h+mpe2d                 3.000e+13   0.00  5.000e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
!!!!!!
mpe5j+o2=mpe4d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mpe4j+o2=mpe4d+ho2            8.070e+11   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mpe4j+o2=mpe3d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mpe3j+o2=mpe3d+ho2            1.950e+12   0.00  5.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186
mpe3j+o2=mpe2d+ho2            2.600e+11   0.00  2.500e+03   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
mpe2j+o2=mpe2d+ho2            1.580e+12   0.00  1.520e+04   !Battin-
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498
!!!!!!
!mpe5oo+mpe5oo=>mpe5o+mpe5o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe5oo+mpe4oo=>mpe5o+mpe4o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe5oo+mpe3oo=>mpe5o+mpe3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe5oo+mpe2oo=>mpe5o+mpe2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe5oo+mpemoo=>mpe5o+mpemo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe4oo+mpe4oo=>mpe4o+mpe4o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe4oo+mpe3oo=>mpe4o+mpe3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
```

```
!mpe4oo+mpe2oo=>mpe4o+mpe2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe4oo+mpemoo=>mpe4o+mpemo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe3oo+mpe3oo=>mpe3o+mpe3o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe3oo+mpe2oo=>mpe3o+mpe2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe3oo+mpemoo=>mpe3o+mpemo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe2oo+mpe2oo=>mpe2o+mpe2o+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe2oo+mpemoo=>mpe2o+mpemo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpemoo+mpemoo=>mpemo+mpemo+o2      1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !16
anc7; irreversi
!mpe5oo+ch3o2=>mpe5o+ch3o+o2  1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!mpe4oo+ch3o2=>mpe4o+ch3o+o2  1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!mpe3oo+ch3o2=>mpe3o+ch3o+o2  1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!mpe2oo+ch3o2=>mpe2o+ch3o+o2  1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!mpemoo+ch3o2=>mpemo+ch3o+o2  1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15  anc7
!!!!!!
!mpe5oo+ho2=mpe5ooh+o2        2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
!mpe4oo+ho2=mpe4ooh+o2        2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
!mpe3oo+ho2=mpe3ooh+o2        2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
!mpe2oo+ho2=mpe2ooh+o2        2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
!mpemoo+ho2=mpemooh+o2        2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !Atkinson
et al., 2001
!!!!!!
!mpe5oo+mpe5j=mpe5o+mpe5o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe5oo+mpe4j=mpe5o+mpe4o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe5oo+mpe3j=mpe5o+mpe3o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe5oo+mpe2j=mpe5o+mpe2o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe5oo+mpemj=mpe5o+mpemo     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe4oo+mpe4j=mpe4o+mpe4o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe4oo+mpe3j=mpe4o+mpe3o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe4oo+mpe2j=mpe4o+mpe2o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe4oo+mpemj=mpe4o+mpemo     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe3oo+mpe3j=mpe3o+mpe3o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe3oo+mpe2j=mpe3o+mpe2o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe3oo+mpemj=mpe3o+mpemo     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe2oo+mpe2j=mpe2o+mpe2o     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe2oo+mpemj=mpe2o+mpemo     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpemoo+mpemj=mpemo+mpemo     7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ho2+mpe5j=oh+mpe5o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ho2+mpe4j=oh+mpe4o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ho2+mpe3j=oh+mpe3o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ho2+mpe2j=oh+mpe2o           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ho2+mpemj=oh+mpemo           7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe5oo+ch3=mpe5o+ch3o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe4oo+ch3=mpe4o+ch3o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe3oo+ch3=mpe3o+ch3o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpe2oo+ch3=mpe2o+ch3o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!mpemoo+ch3=mpemo+ch3o        7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ch3o2+mpe5j=ch3o+mpe5o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ch3o2+mpe4j=ch3o+mpe4o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ch3o2+mpe3j=ch3o+mpe3o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ch3o2+mpe2j=ch3o+mpe2o       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!ch3o2+mpemj=ch3o+mpemo       7.000e+12   0.00 -1.000e+03   !11  anc7
!!!!!!
```

```
!mpe5oo+h2o2=>mpe5ooh+ho2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpe5ooh+ho2=>mpe5oo+h2o2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpe4oo+h2o2=>mpe4ooh+ho2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpe4ooh+ho2=>mpe4oo+h2o2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpe3oo+h2o2=>mpe3ooh+ho2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpe3ooh+ho2=>mpe3oo+h2o2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpe2oo+h2o2=>mpe2ooh+ho2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpe2ooh+ho2=>mpe2oo+h2o2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpemoo+h2o2=>mpemooh+ho2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!mpemooh+ho2=>mpemoo+h2o2     2.400e+12   0.00  1.000e+04   !
anc7;rnc7; one
!!!!!!
!mpe5ooh=mpe5o+oh             1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
!mpe4ooh=mpe4o+oh             9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
!mpe3ooh=mpe3o+oh             9.450e+15   0.00  4.160e+04   !17
anc7, secondary
!mpe2ooh=mpe2o+oh             5.950e+15   0.00  4.254e+04   !17  anc,
tertiary s
!mpemooh=mpemo+oh             1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
!ch2o+mb4j=mpe5o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!ch3hco+mp3j=mpe4o                  1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!ch3+mb4*o=mpe4o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!ethco+me2j=mpe3o       1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18  anc7, alk
to te
!c2h5+mp3*o=mpe3o             1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!nc3h7hco+ch3co2=mpe2o        1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!nc3h7+me2*o=mpe2o                  1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!ch2o+peaoj=mpemo             1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!mpe5*o+h=mpe5o               6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
!mpem*o+h=mpemo               6.628e+09   1.11  4.226e+03   !18
anist: calculat
!!!!!!
!mpe4d+ho2=mpe5ooh4j          1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!mpe4d+ho2=mpe4ooh5j          1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!mpe3d+ho2=mpe4ooh3j          1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!mpe3d+ho2=mpe3ooh4j          1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!mpe2d+ho2=mpe3ooh2j          1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!mpe2d+ho2=mpe2ooh3j          1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
```

```
!mpe5ooh3j=mb3d+ch2o+oh       2.000e13   0.00  2.870e+04   !
!mpe5ooh2j=mp2d+c2h4+ho2            2.000e13   0.00  2.870e+04   !
!mpe4ooh2j=mp2d+ch3hco+oh     2.000e13   0.00  2.870e+04   !
!mpe3ooh5j=mp3*o+c2h4+oh            2.000e13   0.00  2.870e+04   !
!mpe2ooh5j=mp2d+c2h4+ho2            2.000e13   0.00  2.870e+04   !
!mpe2ooh4j=me2*o+c3h6+oh            2.000e13   0.00  2.870e+04   !
!!!!!!
!mpe5ooh3j=>mpecy5o3+oh       9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
!mpe5ooh2j=>mpecy5o2+oh       3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!mpe4ooh2j=>mpecy4o2+oh       9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
!mpe2ooh5j=>mpecy5o2+oh       3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!mpe2ooh4j=>mpecy4o2+oh       9.100e+10   0.00  1.660e+04   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
!mpe2oohmj=>mpecy2om+oh       3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!mpemooh2j=>mpecy2om+oh       3.600e+09   0.00  7.000e+03   !Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!!!!!!
!mpecy5o3+h=>mp3j*o+c2h4+h2         2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy5o3+h=>mb3d+hco+h2                  4.800e+08   1.50  2.785e+03
!25  dbr, see sheet
!mpecy5o2+h=>mp3j2*o+c2h4+h2        4.800e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy5o2+h=>mp2d+ch2hco+h2         4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy4o2+h=>me2j*o+c3h6+h2         4.800e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy4o2+h=>mp2d+ch3co+h2          2.400e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy2om+h=>c3h7coco+ch2o+h2       4.800e+08   1.50  2.005e+03   !25
dbr, see shee
!mpecy2om+h=>c4h8co+ocho+h2         4.800e+08   1.50  2.785e+03   !25
dbr, see shee
!mpecy5o3+oh=>mp3j*o+c2h4+h2o       1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy5o3+oh=>mb3d+hco+h2o          2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy5o2+oh=>mp3j2*o+c2h4+h2o            2.400e+06   2.00 -1.192e+03
!25  dbr, see sheet
!mpecy5o2+oh=>mp2d+ch2hco+h2o       2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy4o2+oh=>me2j*o+c3h6+h2o       2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy4o2+oh=>mp2d+ch3co+h2o        1.200e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see sheet
!mpecy2om+oh=>c3h7coco+ch2o+h2o     2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see shee
!mpecy2om+oh=>c4h8co+ocho+h2o       2.400e+06   2.00 -1.192e+03   !25
dbr, see shee
!mpecy5o3+ho2=>mp3j*o+c2h4+h2o2     2.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
!mpecy5o3+ho2=>mb3d+hco+h2o2        4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan
!mpecy5o2+ho2=>mp3j2*o+c2h4+h2o2    4.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-poly
!mpecy5o2+ho2=>mp2d+ch2hco+h2o2     4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-polyan
!mpecy4o2+ho2=>me2j*o+c3h6+h2o2     4.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-polyan
```

```
!mpecy4o2+ho2=>mp2d+ch3co+h2o2            2.000e+12   0.00  1.326e+04
!25  my evans-polyan
!mpecy2om+ho2=>c3h7coco+ch2o+h2o2   4.000e+12   0.00  1.326e+04   !25
my evans-po
!mpecy2om+ho2=>c4h8co+ocho+h2o2     4.000e+12   0.00  1.440e+04   !25
my evans-po
!!!!!!
!mpe5ooh4oo=mpe4ooh5*o+oh           3.300e+09   1.00  3.550e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)
!mpe5ooh3oo=mpe3ooh5*o+oh           5.700e+08   1.00  2.800e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)
!mpe5ooh2oo=mpe2ooh5*o+oh           1.000e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)
!mpe4ooh5oo=mpe5ooh4*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
!mpe4ooh3oo=mpe3ooh4*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
!mpe4ooh2oo=mpe2ooh4*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
!mpe3ooh5oo=mpe5ooh3*o+oh           2.850e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)
!mpe3ooh4oo=mpe4ooh3*o+oh           1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
!mpe3ooh2oo=>mpe2ooh3*o+oh          1.650e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)
!mpe2ooh5oo=>mpe5ooh2*o+oh          5.000e+07   1.00  1.900e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)
!mpe2ooh4oo=>mpe4ooh2*o+oh          2.850e+07   1.00  2.200e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Ht)
!mpe2ooh3oo=>mpe3ooh2*o+oh          1.650e+09   1.00  2.950e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Ht)
!mpe2oohmoo=>mpemooh2*o+oh          5.000e+07   1.00  1.900e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)
!mpemooh2oo=mpe2oohm*o+oh           1.000e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)
!!!!!!
!mpe4ooh5*o=>mb4*o+hco+oh           1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe3ooh5*o=>mp3*o+ch2hco+oh        1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe3ooh5*o=>me2j+choch2cho+oh            1.500e+16   0.00  4.450e+04
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe2ooh5*o=>ch3co2+choc2h4cho+oh   1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe5ooh4*o=>mb4j*o+ch2o+oh         1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe3ooh4*o=>mp3*o+ch3co+oh         1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe2ooh4*o=>ch3co2+c4ald3oxo+oh    1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe5ooh3*o=>mb4j3*o+ch2o+oh        1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe4ooh3*o=>mp3j*o+ch3hco+oh       1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe2ooh3*o=>me2*o+c2h5co+oh        1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe2ooh3*o=>ch3co2+c4ald2oxo+oh    1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe5ooh2*o=>mb4j2*o+ch2o+oh        1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe4ooh2*o=>mp3j2*o+ch3hco+oh            1.500e+16   0.00  4.450e+04
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe3ooh2*o=>me2j*o+ethco+oh        1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)
```

```
!mpemooh2*o=>peaoj2*o+ch2o+oh       1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177 (+2.5kcal)
!mpe2oohm*o=>chooco+nc3h7hco+oh     1.500e+16   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177 (+2.5kcal)
!!!!!!
mpe4d  +     o       = mpe4d3j +      oh          8.800E+10   0.7
3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     o       = mpe4d2j +      oh          8.800E+10   0.7
3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     h       = mpe4d3j +      h2          5.400E+04   2.5   -
1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     h       = mpe4d2j +      h2          5.400E+04   2.5   -
1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     oh      = mpe4d3j +     h2o          3.000E+06   2.0   -
1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     oh      = mpe4d2j +     h2o          3.000E+06   2.0   -
1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     ho2     = mpe4d3j +    h2o2          6.400E+03   2.6
1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     ho2     = mpe4d2j +    h2o2          6.400E+03   2.6
1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(2Hs all)
mpe4d  +     oh      =    mb4j +    ch2o          1.000E+11   0.0   -
4000.0 !Mohammed (curran2000)
mpe4d  +     oh      =     ch3 +   mb4*o          1.370e+12   0.00 -
1.040e+03   !Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mpe4d+ch3o=mpe4d3j+ch3oh     1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mpe4d+ch3o=mpe4d2j+ch3oh     1.880e+12   0.00  1.200e+03   !Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mpe4d                =   me2j +   ac3h5        2.500E+16  0.0
68000.0 !
c2h3    +   mp3j     =   mpe4d                 1.000E+13   0.0
0.0 !(30/06/2000)
mpe4d  +     o2      = mpe4d3j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mpe4d  +     o2      = mpe4d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mpe4d  +     ch3     = mpe4d3j +     ch4         2.000E+11   0.0
6800.0 !(WESTB.87)
!mpe4d  +     ch3     = mpe4d2j +     ch4         2.000E+11   0.0
6800.0 !(WESTB.87)
mpe4d  +      o      = mb4j  +     hco           1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mpe4d3j +      h     = mpe4d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
mpe4d2j +      h     = mpe4d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
!mpe4d3j +    ho2     => me2j +  acrol+   oh   1.000E+12   0.0
8000.0 !(07/09/2000)
!mpe4d2j +    ho2     => ac3h5 +  me2*o +   oh   1.000E+12   0.0
8000.0 !(07/09/2000)
mpe4d3j              =  ch3co2 +    c4h6         1.300e+13   0.00
3.590e+04   !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(Rs+1,3-diene)
mpe4d2j              =  mp2d +     c2h3          1.000E+12   0.0
50000.0 !(02/09/2000)
```

```
c4h6co+ch3o=mpe4d2j                 5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!
mpe3d+o=mpe4d3j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+o=mpe3d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+h=mpe4d3j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+h=mpe3d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+oh=mpe4d3j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+oh=mpe3d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+ho2=mpe4d3j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+ho2=mpe3d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe3d+oh=ch3hco+mp3j                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mpe3d+oh=c2h5+mp3*o                 1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mpe3d+ch3o=mpe4d3j+ch3oh           1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mpe3d+ch3o=mpe3d2j+ch3oh           1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mpe3d  +     o2      = mpe4d3j +     ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
mpe3d  +     o2      = mpe3d2j +     ho2         4.000E+13   0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mpe3d  +     ch3     = mpe4d3j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
!mpe3d  +     ch3     = mpe3d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mpe3d  +      o      = mp3j  +    ch3co          1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mpe3d2j +      h     = mpe3d                     1.000E+13   0.0
0.0 !(RTi)
!mpe3d2j=c4h6co+ch3o                2.000e+13   0.00  1.500e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(R+cetone/aldehyde)
c4h6co+ch3o=mpe3d2j                 5.000e+11   0.00 -1.000e+03   !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mpe2d+o=mpe3d2j+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe2d+h=mpe3d2j+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe2d+oh=mpe3d2j+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
mpe2d+ho2=mpe3d2j+h2o2              6.400e+03   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)
!mpe2d+ch3o=mpe3d2j+ch3oh           1.880e+12   0.00  1.200e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mpe2d  +     o2      = mpe3d2j +    ho2         4.000E+12   0.0
37000.0 !
!mpe2d  +     ch3     = mpe3d2j +     ch4         1.000E+11   0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs
ally)
mpe2d  +      o      = me2j  +    c2h5co         1.000E+11   0.0   -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
```

```
mpe2d+oh=ethco+me2j                 1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mpe2d+oh=nc3h7+me2*o                1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!!!!!
hco+mb4j=mpe5*o                1.000e+13   0.00  0.000e+00   !9
ALLARA and shaw
mpe5*o+o2=mpe5j*o+ho2          2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
mpe5*o+h=mpe5j*o+h2            4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7: aldehydic
mpe5*o+oh=mpe5j*o+h2o          2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
mpe5*o+o=mpe5j*o+oh            5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o+ho2=mpe5j*o+h2o2        2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
mpe5j*o=mb4j+co                1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mpe5j2*o=c2h4+mp3j2*o          2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhx6j3*o=c2h4+mb4j3*o          2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
mhp7j4*o=c2h4+mpe5j4*o         2.000e+13   0.00  2.870e+04   !Dayma et
al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
!!!!!!
!!!!!Cc7h15=c7h14-1+h                3.000e+13   0.00  3.800e+04   !
Dayma et al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
!!!!!Dc7h15=c7h14-1+h                3.000e+13   0.00  3.800e+04   !
Dayma et al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285 (2Hs)
!!!!!c7h13oAqC=>ethco+c3h7co+oh     7.500e+15   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!!!!!c6h13qjB=c6h12rAqE             8.550e+08   1.00  2.800e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
!!!!!c6h12rAqE+o2=c6h12qjAqE        1.800e+19  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!!!!!c6h12qjAqE=c6h11oEqA+oh  1.240e+11   0.00  1.915e+04   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177
!!!!!c6h11oEqA=>c3h6coch3-1+ch2o+oh 7.500e+15   0.00  4.450e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
mpe5j4*o=>ch2co+mp3j           1.000e+13   0.00  2.800e+04   !Sato et
al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
mb4j3*o=>ch2co+me2j            1.000e+13   0.00  2.800e+04   !Sato et
al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311
!mb4j3*o=>mbmj3*o              1.500e+08   1.00  1.790e+04   !Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002) 1186-1195 (cyc sat ? 7 + 3Hp)-2kcal
pr O
!mbmj3*o=>ch2o+co+ch2coch3     2.000e+13   0.00  3.000e+04
!c2h4+me2j*o=mb4j2*o           2.110e+11   0.00  7.350e+03   !3
anc7:ch3co+c2h4
!c2h4+mp3j*o=mpe5j3*o          2.110e+11   0.00  7.350e+03   !3
anc7:ch3co+c2h4
hco+mp3j2*o=mb4*o2*o           1.000e+13   0.00  0.000e+00
hco+mb4j3*o=mpe5*o3*o          1.000e+13   0.00  0.000e+00

!!!!!c7h14co=Ac6h13+hcco             1.500e+11   0.00  3.000e+03   !27
andme: co+ch3o=
!!!!!c7h12co=c6h1112+hcco            1.500e+11   0.00  3.000e+03   !27
andme: co+ch3o=
!!!!!c6h12co=Ac5h11+hcco             1.500e+11   0.00  3.000e+03   !27
andme: co+ch3o=
!!!!!c6h10co=c5h915+hcco             1.500e+11   0.00  3.000e+03   !27
andme: co+ch3o=
!!!!!c5h10co=pc4h9+hcco        1.500e+11   0.00  3.000e+03   !27
andme: co+ch3o=
!!!!!c5h8co=Cc4h7-1+hcco                1.500e+11   0.00  3.000e+03
!27  andme: co+ch3o=
!!!!!c4h8co=nc3h7+hcco               1.500e+11   0.00  3.000e+03   !27
andme: co+ch3o=
!!!!!c4h6co=sc3h5+hcco        1.500e+11   0.00  3.000e+03   !27
andme: co+ch3o=

!!!!!c7ald4oxo+o2=bucomeco+ho2      2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
!!!!!c7ald4oxo+oh=prcoetco+h2o      2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c7ald4oxo+h=prcoetco+h2        4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c7ald4oxo+o=prcoetco+oh        5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c7ald4oxo+ho2=prcoetco+h2o2    2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c7ald4oxo+ch3o=prcoetco+ch3oh        1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
!!!!!c7ald4oxo+ch3o2=prcoetco+ch3o2h            1.000E+12   0.00
9.500E+03   !26  anc7: aldehydic

!!!!!c6ald5oxo+o2=prcomeco+ho2      2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
!!!!!c6ald5oxo+oh=prcomeco+h2o      2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c6ald5oxo+h=prcomeco+h2        4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c6ald5oxo+o=prcomeco+oh        5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c6ald5oxo+ho2=prcomeco+h2o2    2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c6ald5oxo+ch3o=prcomeco+ch3oh        1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
!!!!!c6ald5oxo+ch3o2=prcomeco+ch3o2h            1.000E+12   0.00
9.500E+03   !26  anc7: aldehydic

!!!!!c6ald4oxo+o2=etcoetco+ho2      2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
!!!!!c6ald4oxo+oh=etcoetco+h2o      2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c6ald4oxo+h=etcoetco+h2        4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c6ald4oxo+o=etcoetco+oh        5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c6ald4oxo+ho2=etcoetco+h2o2    2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c6ald4oxo+ch3o=etcoetco+ch3oh        1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
!!!!!c6ald4oxo+ch3o2=etcoetco+ch3o2h            1.000E+12   0.00
9.500E+03   !26  anc7: aldehydic

!!!!!c5ald4oxo+o2=mecoetco+ho2      2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
!!!!!c5ald4oxo+oh=mecoetco+h2o      2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c5ald4oxo+h=mecoetco+h2        4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c5ald4oxo+o=mecoetco+oh        5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c5ald4oxo+ho2=mecoetco+h2o2    2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c5ald4oxo+ch3o=mecoetco+ch3oh        1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
!!!!!c5ald4oxo+ch3o2=mecoetco+ch3o2h            1.000E+12   0.00
9.500E+03   !26  anc7: aldehydic

!!!!!c5ald2oxo+o2=prcoco+ho2        2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
!!!!!c5ald2oxo+oh=prcoco+h2o        2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c5ald2oxo+h=prcoco+h2          4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c5ald2oxo+o=prcoco+oh          5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
!!!!!c5ald2oxo+ho2=prcoco+h2o2      2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
!!!!!c5ald2oxo+ch3o=prcoco+ch3oh          1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
c5ald2oxo+ch3o2=prcoco+ch3o2h       1.000E+12   0.00  9.500E+03   !26
anc7: aldehydic

c4ald2oxo+o2=c2h5coco+ho2     2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
c4ald2oxo+oh=c2h5coco+h2o     2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic
c4ald2oxo+h=c2h5coco+h2       4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
c4ald2oxo+o=c2h5coco+oh       5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
c4ald2oxo+ho2=c2h5coco+h2o2   2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic
c4ald2oxo+ch3o=c2h5coco+ch3oh       1.150E+11   0.00  1.280E+03   !26
anc7: aldehydic
c4ald2oxo+ch3o2=c2h5coco+ch3o2h           1.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic
prcoetco=>nc3h7coc2h4p+co           1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
etcoetco=c2h5coc2h4p+co       1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mecoetco=>ch3coc2h4p+co       1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
prcoco=>c3h7co+co       1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude et al.,
DMC c2h5co
!!!!!!
choch2cho+o2=choch2co+ho2     4.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco*2
choch2cho+oh=choch2co+h2o     5.400e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic*2
choch2cho+h=choch2co+h2       8.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic*2
choch2cho+o=choch2co+oh       1.000e+13   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic*2
choch2cho+ho2=choch2co+h2o2   5.600e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic*2
choch2cho+ch3o=choch2co+ch3oh       2.300E+11   0.00  1.280E+03   !26
anc7: aldehydic*2
choch2cho+ch3o2=choch2co+ch3o2h           2.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic*2
choch2co=>ch2hco+co           1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
choc2h4cho+o2=choc2h4co+ho2   4.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco*2
choc2h4cho+oh=choc2h4co+h2o   5.400e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic*2
choc2h4cho+h=choc2h4co+h2     8.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic*2
choc2h4cho+o=choc2h4co+oh     1.000e+13   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic*2
choc2h4cho+ho2=choc2h4co+h2o2 5.600e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic*2
choc2h4cho+ch3o=choc2h4co+ch3oh           2.300E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic*2
choc2h4cho+ch3o2=choc2h4co+ch3o2h         2.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic*2
choc2h4co=>ch2ch2hco+co       1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
choc3h6cho+o2=choc3h6co+ho2   4.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco*2
choc3h6cho+oh=choc3h6co+h2o   5.400e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7: aldehydic*2
choc3h6cho+h=choc3h6co+h2     8.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic*2
choc3h6cho+o=choc3h6co+oh     1.000e+13   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic*2
choc3h6cho+ho2=choc3h6co+h2o2 5.600e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7: aldehydic*2
choc3h6cho+ch3o=choc3h6co+ch3oh           2.300E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic*2
choc3h6cho+ch3o2=choc3h6co+ch3o2h         2.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic*2
choc3h6co=>c3h6cho-1+co       1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
co2+nc4h9co=hxaoj2*o          1.000e+11  0.000  30850.0   !27  since
reaction
co2+c5h11co=hpaoj2*o          1.000e+11  0.000  30850.0   !27  since
reaction
!!!!!!
mb4*o2*o+h=mb4j*o2*o+h2       4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
mb4*o2*o+oh=mb4j*o2*o+h2o     2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7; aldehydic
mb4*o2*o+o=mb4j*o2*o+oh       5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mb4*o2*o+ho2=mb4j*o2*o+h2o2   2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7; aldehydic
mb4*o2*o+ch3=mb4j*o2*o+ch4    1.700e+12   0.00  8.440e+03   !26
anc7; aldehydic
mb4*o2*o+ch3o=mb4j*o2*o+ch3oh       1.150E+11   0.00  1.280E+03   !26
anc7: aldehydic
mb4*o2*o+ch3o2=mb4j*o2*o+ch3o2h           1.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic
mb4j*o2*o=co+mp3j2*o          1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mpe5*o4*o+h=mpe5j*o4*o+h2     4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o4*o+oh=mpe5j*o4*o+h2o   2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o4*o+o=mpe5j*o4*o+oh     5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o4*o+ho2=mpe5j*o4*o+h2o2 2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o4*o+ch3=mpe5j*o4*o+ch4  1.700e+12   0.00  8.440e+03   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o4*o+ch3o=mpe5j*o4*o+ch3oh           1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
mpe5*o4*o+ch3o2=mpe5j*o4*o+ch3o2h         1.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic
mpe5j*o4*o=co+mb4j*o          1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mpe5*o3*o+h=mpe5j*o3*o+h2     4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
```

```
anc7; aldehydic
mpe5*o3*o+oh=mpe5j*o3*o+h2o   2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o3*o+o=mpe5j*o3*o+oh     5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o3*o+ho2=mpe5j*o3*o+h2o2 2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o3*o+ch3=mpe5j*o3*o+ch4  1.700e+12   0.00  8.440e+03   !26
anc7; aldehydic
mpe5*o3*o+ch3o=mpe5j*o3*o+ch3oh           1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
mpe5*o3*o+ch3o2=mpe5j*o3*o+ch3o2h         1.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic
mpe5j*o3*o=co+mb4j3*o         1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mhx6*o4*o+h=mhx6j*o4*o+h2     4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
mhx6*o4*o+oh=mhx6j*o4*o+h2o   2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7; aldehydic
mhx6*o4*o+o=mhx6j*o4*o+oh     5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mhx6*o4*o+ho2=mhx6j*o4*o+h2o2 2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7; aldehydic
mhx6*o4*o+ch3=mhx6j*o4*o+ch4  1.700e+12   0.00  8.440e+03   !26
anc7; aldehydic
mhx6*o4*o+ch3o=mhx6j*o4*o+ch3oh           1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
mhx6*o4*o+ch3o2=mhx6j*o4*o+ch3o2h         1.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic
mhx6j*o4*o=co+mpe5j4*o        1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
mhp7*o5*o+h=mhp7j*o5*o+h2     4.000e+13   0.00  4.200e+03   !26
anc7; aldehydic
mhp7*o5*o+oh=mhp7j*o5*o+h2o   2.690e+10   0.76 -3.400e+02   !26
anc7; aldehydic
mhp7*o5*o+o=mhp7j*o5*o+oh     5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
mhp7*o5*o+ho2=mhp7j*o5*o+h2o2 2.800e+12   0.00  1.360e+04   !26
anc7; aldehydic
mhp7*o5*o+ch3=mhp7j*o5*o+ch4  1.700e+12   0.00  8.440e+03   !26
anc7; aldehydic
mhp7*o5*o+ch3o=mhp7j*o5*o+ch3oh           1.150E+11   0.00  1.280E+03
!26  anc7: aldehydic
mhp7*o5*o+ch3o2=mhp7j*o5*o+ch3o2h         1.000E+12   0.00  9.500E+03
!26  anc7: aldehydic
mhp7j*o5*o=co+mhx6j5*o        1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !Glaude
et al., DMC c2h5co
co2+c6h13co=oaoj2*o           1.000e+11   0.00  3.085e+04   !27
since reaction
!!!!!!
mhp6d4d+oh=h2o+nc4h5+mp2d           2.000e+13   0.00  0.000e+00   !
mhx5d3d+oh=h2o+c2h2+ac3h5+ch2o+co   2.000e+13   0.00  0.000e+00   !
mpe4d2d+oh=h2o+nc4h5+ch2o+co        2.000e+13   0.00  0.000e+00   !
mhp6d4d+h=h2+nc4h5+mp2d             2.000e+13   0.00  0.000e+00   !
mhx5d3d+h=h2+c2h2+ac3h5+ch2o+co     2.000e+13   0.00  0.000e+00   !
mpe4d2d+h=h2+nc4h5+ch2o+co          2.000e+13   0.00  0.000e+00   !
!mhp6d4d+ho2=h2o2+nc4h5+mp2d        2.000e+12   0.00  0.000e+00   !
!mhx5d3d+ho2=h2o2+c2h2+ac3h5+ch2o+co      2.000e+12   0.00  0.000e+00
!
!mpe4d2d+ho2=h2o2+nc4h5+ch2o+co     2.000e+12   0.00  0.000e+00   !
mhx6*o3*o+oh=>co+co+c2h4+me2j+h2o   1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
mpe5*o2*o+oh=>co+co+c2h4+ch3co2+h2o 1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
```

```
mhx6*o3*o+h=>co+co+c2h4+me2j+h2     1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
mpe5*o3*o+h=>co+ch2co+me2j+h2       1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
mpe5*o2*o+h=>co+co+c2h4+ch3co2+h2   1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
mhx6*o3*o+ho2=>co+co+c2h4+me2j+h2o2 1.834e+14  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
mpe5*o2*o+ho2=>co+co+c2h4+ch3co2+h2o2     1.834e+14  -0.73  1.291e+04
!Glaude et al., DMC c2h5co
mp3j+o2=mp2d+ho2              1.000e+12   0.00  5.030e+03   !as c3h8
Warnatz 84
!mp3j=mpmj                    9.256e+10  -0.654 1.390e+04   !5
radicalc, rs fo
!mpmj=ch2o+c2h5co             1.640e+22  -2.33  3.195e+04   !Dooley
et al., Combust. Flame, 153 (2008) 2-32
ch2hco+h=>ch3hco              2.000e+14   0.00  0.0
mb4j+o2=mb3d+ho2              1.580e+12   0.00  5.000e+03   !Touchard
(2005) Th?se INPL
mb3j+o2=mb3d+ho2              6.900e+11   0.00  5.000e+03   !Touchard
(2005) Th?se INPL
mp2d+h<=>mp2d3j+h2 1.300E+06 2.40 4.471E+03
mp2d+oh<=>mp2d3j+h2o 4.680E+07 1.61 -3.500E+01
mp2d+ch3<=>mp2d3j+ch4 1.510E+00 3.46 5.481E+03
mp2d+ho2<=>mp2d3j+h2o2 9.640E+03 2.60 1.391E+04
mp2d+o<=>mp2d3j+oh 5.520E+05 2.45 2.830E+03
mp2d+ch3o2<=>mp2d3j+ch3o2h 9.640E+03 2.60 1.391E+04
mp2d+h<=>mp2d2j+h2 6.020E+05 2.40 2.583E+03
mp2d+oh<=>mp2d2j+h2o 5.730E+10 0.51 6.300E+01
mp2d+ch3<=>mp2d2j+ch4 6.010E-10 6.36 8.930E+02
mp2d+ho2<=>mp2d2j+h2o2 3.610E+03 2.55 1.053E+04
mp2d+o<=>mp2d2j+oh 3.830E+05 2.41 1.140E+03
mp2d+ch3o2<=>mp2d2j+ch3o2h 3.610E+03 2.55 1.053E+04
mp2d+h<=>mp2dmj+h2 1.960E+06 2.40 4.471E+03
mp2d+oh<=>mp2dmj+h2o 7.020E+07 1.61 -3.500E+01
mp2d+ch3<=>mp2dmj+ch4 2.265E+00 3.46 5.481E+03
mp2d+ho2<=>mp2dmj+h2o2 1.446E+04 2.60 1.391E+04
mp2d+o<=>mp2dmj+oh 8.280E+05 2.45 2.830E+03
mp2d+ch3o2<=>mp2dmj+ch3o2h 1.446E+04 2.60 1.391E+04
mp2d<=>c2h3co+ch3o 2.981E+22 -1.91 9.017E+04
mp2d<=>c2h3co2+ch3 3.839E+22 -2.00 8.803E+04
mp2d3j<=>c2h2+ch3co2 7.683E+19 -1.53 4.741E+04
mp2d2j<=>c2h2+ch3co2 6.296E+24 -2.85 5.615E+04
mp2dmj<=>c2h3co+ch2o 5.752E+23 -2.82 2.354E+04
mp2dmj<=>mp2d3j 4.354E+13 -1.36 1.254E+04
mp2dmj<=>mp2d2j 4.987E+09 -0.24 1.716E+04
mp2d2j<=>mp2d3j 3.120E+13 0.24 4.214E+04
!!!!!!
c7h14-1+oh=c7h13+h2o                3.000e+06   2.00 -1.520e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs)
c7h14-1+h=c7h13+h2                  5.400e+04   2.50 -1.900e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs)
c7h14-1+ho2=c7h13+h2o2              6.400e+04   2.60  1.240e+04   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs)
c7h14-1+o=c7h13+oh                  8.800e+10   0.70  3.250e+03   !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs)
c7h14-1+oh=ch3+c5h11hco             1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!!!!!!
c7h13=c7h13a                        8.550e+08   1.00  2.450e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 3Hp)
c7h13=c7h13b                        3.300e+09   1.00  2.730e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
c7h13=c4h6+nc3h7                    1.300e+13   0.00  3.590e+04   !
```

```
Heyberger (2002) Th?se INPL
c7h13a=c2h4+c5h915                  2.000e+13   0.00  2.870e+04   !
Dayma et al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
c7h13b=c3h6+Cc4h7-1                       2.000e+13   0.00  2.870e+04
!Dayma et al.,Int J Chem Kinet, 35 (2003) 273-285
!!!!!!
nc4h9hco+o2=nc4h9co+ho2             2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+o=nc4h9co+oh               5.000E+12   0.00  1.790E+03   !26
anc7: aldehydic
nc4h9hco+ch3o=nc4h9co+ch3oh         1.150E+11   0.00  1.280E+03   !26
anc7: aldehydic
nc4h9hco+ch3o2=nc4h9co+ch3o2h       1.000E+12   0.00  9.500E+03   !26
anc7: aldehydic
nc4h9hco+oh=c4h8cho-1+h2o           5.270E+09   0.97  1.586E+03   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+oh=c4h8hco-2+h2o           4.670E+07   1.61 -3.500E+01   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+oh=c4h8cho-3+h2o           4.670E+07   1.61 -3.500E+01   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+oh=c4h8cho-4+h2o           2.700E+09   1.00 -1.490E+02   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ho2=c4h8cho-1+h2o2         9.030E-01   3.65  7.153E+03   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ho2=c4h8hco-2+h2o2         1.475E+04   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ho2=c4h8cho-3+h2o2         1.475E+04   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ho2=c4h8cho-4+h2o2         3.610E+03   2.55  1.053E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ch3o2=c4h8cho-1+ch3o2h     6.030E+12   0.00  1.938E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ch3o2=c4h8hco-2+ch3o2h     9.630E+03   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ch3o2=c4h8cho-3+ch3o2h     9.630E+03   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9hco+ch3o2=c4h8cho-4+ch3o2h     9.630E+03   2.60  1.151E+04   !as
nc3h7hco
nc4h9co=pc4h9+co                    1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
c4h8cho-4=acrol+c2h5                7.400E+11   0.00  2.197E+04   !as
c3h6cho-1
c4h8cho-3=ch3+ac3h5cho              3.174E+14  -0.39  2.990E+04   !as
c3h6cho-3
c4h8cho-3=c4h8+hco                  8.249E+12  -0.18  2.190E+04   !as
c3h6cho-2
c5h11hco+ch3o=c5h11co+ch3oh         1.150E+11   0.00  1.280E+03   !26
anc7; aldehydic
c5h11hco+ch3o2=c5h11co+ch3o2h       1.000E+12   0.00  9.500E+03   !26
anc7; aldehydic
c5h11co=>Ac5h11+co                  1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
c6h13hco+o=c6h13co+oh               5.000e+12   0.00  1.790e+03   !26
anc7; aldehydic
c6h13hco+ch3o=c6h13co+ch3oh         1.150E+11   0.00  1.280E+03   !26
anc7; aldehydic
c6h13hco+ch3o2=c6h13co+ch3o2h       1.000E+12   0.00  9.500E+03   !26
anc7; aldehydic
c6h13hco+oh=c6h12cho-1+h2o          5.270E+09   0.97  1.586E+03   !as
nc3h7hco
c6h13hco+oh=c6h12cho-2+h2o          4.670E+07   1.61 -3.500E+01   !as
nc3h7hco
c6h13hco+oh=c6h12cho-3+h2o          4.670E+07   1.61 -3.500E+01   !as
nc3h7hco
```

```
c6h13hco+oh=c6h12cho-4+h2o          4.670E+07   1.61 -3.500E+01   !as
nc3h7hco
c6h13hco+oh=c6h12cho-5+h2o          4.670E+07   1.61 -3.500E+01   !as
nc3h7hco
c6h13hco+oh=c6h12cho-6+h2o          2.700E+09   1.00 -1.490E+02   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ho2=c6h12cho-1+h2o2        9.030E-01   3.65  7.153E+03   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ho2=c6h12cho-2+h2o2        1.475E+04   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ho2=c6h12cho-3+h2o2        1.475E+04   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ho2=c6h12cho-4+h2o2        1.475E+04   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ho2=c6h12cho-5+h2o2        1.475E+04   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ho2=c6h12cho-6+h2o2        3.610E+03   2.55  1.053E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-1+ch3o2h    6.030E+12   0.00  1.938E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-2+ch3o2h    9.630E+03   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-3+ch3o2h    9.630E+03   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-4+ch3o2h    9.630E+03   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-5+ch3o2h    9.630E+03   2.60  1.391E+04   !as
nc3h7hco
c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-6+ch3o2h    9.630E+03   2.60  1.151E+04   !as
nc3h7hco
c6h12cho-6=acrol+pc4h9        7.400E+11   0.00  2.197E+04   !as
c3h6cho-1
c6h12cho-5=c6h12-1+hco              8.249E+12  -0.18  2.190E+04   !as
c3h6cho-2
c6h12cho-5=nc3h7+ac3h5cho           2.000E+13   0.00  2.870E+04   !C-
C
c6h12cho-4=c5h10+ch2hco       7.400E+11   0.00  2.197E+04   !as
c3h6cho-1
c6h12cho-4=c2h5+c4h6+ch2o           1.000E+13   0.00  2.870E+04   !
estimated
c6h12cho-3=ch3+c4h6+ch3hco          3.174E+14  -0.39  2.990E+04   !
estimated
c6h12cho-3=c4h8+ch2ch2hco           8.249E+12  -0.18  2.190E+04   !as
c3h6cho-2
c6h12cho-2=c3h6+c3h6cho-1           7.400E+11   0.00  2.197E+04   !as
c3h6cho-1
c6h12cho-1=c2h4+c4h8cho-1           7.400E+11   0.00  2.197E+04   !as
c3h6cho-1
c6h13coco=c6h13co+co                1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
c5h11cocho+o2=c5h11coco+ho2         2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
c5h11cocho+oh=c5h11coco+h2o         1.000E+13   0.00  0.000E+00   !as
nc3h7hco
c5h11cocho+h=c5h11coco+h2           4.000E+13   0.00  4.200E+03   !as
nc3h7hco
c5h11cocho+o=c5h11coco+oh           5.000E+12   0.00  1.790E+03   !as
nc3h7hco
c5h11cocho+ho2=c5h11coco+h2o2       2.800E+12   0.00  1.360E+04   !as
nc3h7hco
c5h11cocho+ch3=c5h11coco+ch4        1.700E+12   0.00  8.440E+03   !as
nc3h7hco
c5h11cocho+ch3o=c5h11coco+ch3oh     1.150E+11   0.00  1.280E+03   !as
nc3h7hco
```

```
c5h11cocho+ch3o2=c5h11coco+ch3o2h   1.000E+12   0.00  9.500E+03   !as
nc3h7hco
c5h11coco=c5h11co+co                1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
c4h9cocho+o2=c4h9coco+ho2           2.000E+13   0.50  4.220E+04   !as
nc3h7hco
c4h9cocho+oh=c4h9coco+h2o           1.000E+13   0.00  0.000E+00   !as
nc3h7hco
c4h9cocho+h=c4h9coco+h2             4.000E+13   0.00  4.200E+03   !as
nc3h7hco
c4h9cocho+o=c4h9coco+oh             5.000E+12   0.00  1.790E+03   !as
nc3h7hco
c4h9cocho+ho2=c4h9coco+h2o2         2.800E+12   0.00  1.360E+04   !as
nc3h7hco
c4h9cocho+ch3=c4h9coco+ch4          1.700E+12   0.00  8.440E+03   !as
nc3h7hco
c4h9cocho+ch3o=c4h9coco+ch3oh       1.150E+11   0.00  1.280E+03   !as
nc3h7hco
c4h9cocho+ch3o2=c4h9coco+ch3o2h     1.000E+12   0.00  9.500E+03   !as
nc3h7hco
c4h9coco=nc4h9co+co                 1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
c3h7coco=c3h7co+co                  1.834e+15  -0.73  1.291e+04   !
Glaude et al., DMC c2h5co
!!!!!!
!c4h9po2=pc4h9+o2                   6.155e+19  -1.38  3.551e+04   !
c4h9po2+ho2=pc4h9o2h+o2             2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
c4h9po2+ch3o2=>pc4h9o+ch3o+o2       1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
pc4h9o2h=pc4h9o+oh                  1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
ch2o+nc3h7=pc4h9o                   1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc5h11o2h=pent1o+oh                 1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
ch2o+pc4h9=pent1o                   1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
c4h9po2=ic4h8ooh                    3.300e+09   1.00  3.250e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)
c4h8+ho2=ic4h8ooh             1.500e+11   0.00  7.800e+03   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
ic4h8ooh+o2=io2c4h8ooh              1.050e+19  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
io2c4h8ooh=ioohc4h8o+oh             3.300e+09   1.00  3.550e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)
ioohc4h8o=ethco+hco+oh        1.500e+16   0.00  4.200e+04   !Curran
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
c4h9po2=jc4h8ooh                    5.700e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)
jo2c4h8ooh=joohc4h8o+oh             5.700e+08   1.00  2.800e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)
joohc4h8o=ch3hco+ch2hco+oh          1.500e+16   0.00  4.200e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
c4h9po2=kc4h8ooh                    1.500e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)
kc4h8ooh+o2=ko2c4h8ooh              9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
ko2c4h8ooh=koohc4h8o+oh             1.000e+08   1.00  2.500e+04   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)
koohc4h8o=ch2o+ch2ch2hco+oh         1.500e+16   0.00  4.200e+04   !
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177
!!!!!!
mhx6j5*o+o2=mhx6oo5*o               9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhx6oo5*o+ho2=mhx6ooh5*o+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mhx6ooh5*o=mhx6o5*o+oh              1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mhx6oo5*o+ch3o2=>mhx6o5*o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+mpe5j*o=mhx6o5*o               1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mhx6j4*o+o2=mhx6oo4*o               9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhx6oo4*o+ho2=mhx6ooh4*o+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mhx6ooh4*o=mhx6o4*o+oh              1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mhx6oo4*o+ch3o2=>mhx6o4*o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+mpe5j4*o=mhx6o4*o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mhx6j3*o+o2=mhx6oo3*o               9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mhx6oo3*o+ho2=mhx6ooh3*o+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mhx6ooh3*o=mhx6o3*o+oh              1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mhx6oo3*o+ch3o2=>mhx6o3*o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+mpe5j3*o=mhx6o3*o              1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ch2cooch3+o2=acetoo2                9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
acetoo2+ho2=acetoo2h+o2             2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
acetoo2h=acetoo+oh                  1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
acetoo2+ch3o2=>acetoo+ch3o+o2       1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+ch3co=acetoo                   1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
nc3h7coc2h4o2+ho2=nc3h7coc2h4o2h+o2       2.290e+11   0.00 -1.790e+03
!Atkinson et al., 2001
nc3h7coc2h4o2h=nc3h7coc2h4o+oh            1.500e+16   0.00  4.250e+04
!17  anc7, primary s
nc3h7coc2h4o2+ch3o2=>nc3h7coc2h4o+ch3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03
!15  anc7
nc4h9coch2o2+ch3o2=>nc4h9coch2o+ch3o+o2         1.400e+16  -1.61
1.860e+03   !15  anc7
ch3coc2h4o2+ch3o2=>ch3coc2h4o+ch3o+o2     1.400e+16  -1.61  1.860e+03
!15  anc7
c2h5coch2o2+ch3o2=>c2h5coch2o+ch3o+o2           1.400e+16  -1.61
1.860e+03   !15  anc7
ch3coc3h6o2-1+ch3o2=>ch3coc3h6o-1+ch3o+o2 1.400e+16  -1.61  1.860e+03
!15  anc7
c2h5coc2h4o2+ch3o2=>c2h5coc2h4o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03
!15  anc7
nc3h7coch2o2+ch3o2=>nc3h7coch2o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03
!15  anc7
mb4j3*o+o2=mb4oo3*o                 9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mb4oo3*o+ho2=mb4ooh3*o+o2           2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mb4ooh3*o=mb4o3*o+oh                1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mb4oo3*o+ch3o2=>mb4o2*o+ch3o+o2     1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+mp3j2*o=mb4o2*o                1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mp2dmj+o2=mp2dmoo                   9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mp2dmoo+ho2=mp2dmooh+o2             2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mp2dmooh=mp2dmo+oh                  1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mp2dmoo+ch3o2=>mp2dmo+ch3o+o2       1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+c2h3co2=mp2dmo                 1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
!me2j+o2=me2oo                      9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!me2j+o2=me2oo                      1.200e+10   0.00 -2.300e+03   !
me2oo+ho2=me2ooh+o2                 2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
me2ooh=me2o+oh                      1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
me2oo+ch3o2=>me2o+ch3o+o2           1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+ch3co2=me2o                    1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mpe5j4*o+o2=mpe5oo4*o               9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mpe5oo4*o+ho2=mpe5ooh4*o+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mpe5ooh4*o=mpe5o4*o+oh              1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mpe5oo4*o+ch3o2=>mpe5o4*o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+mb4j*o=mpe5o4*o                1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mpe5j3*o+o2=mpe5oo3*o               9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mpe5oo3*o+ho2=mpe5ooh3*o+o2         2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mpe5ooh3*o=mpe5o3*o+oh              1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mpe5oo3*o+ch3o2=>mpe5o3*o+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+mb4j3*o=mpe5o3*o               1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mp3j+o2=mp3oo                       9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mp3oo+ho2=mp3ooh+o2                 2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mp3ooh=mp3o+oh                      1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mp3oo+ch3o2=>mp3o+ch3o+o2           1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+me2j=mp3o                      1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
mp3j2*o+o2=>mp3oo2*o                9.000e+18  -2.50  0.000e+00   !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
mp3oo2*o+ho2=>mp3ooh2*o+o2          2.290e+11   0.00 -1.790e+03   !
Atkinson et al., 2001
mp3ooh2*o=>mp3o2*o+oh               1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
mp3oo2*o+ch3o2=>mp3o2*o+ch3o+o2     1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
ch2o+me2j*o=mp3o2*o                 1.500e+11   0.00  1.190e+04   !18
anc7, alk to te
ho2c2h4cho=>oc2h4cho+oh             1.500e+16   0.00  4.250e+04   !17
anc7, primary s
o2c2h4cho+ch3o2=>oc2h4cho+ch3o+o2   1.400e+16  -1.61  1.860e+03   !15
anc7
!!!!!!
nc5h12=pc4h9+ch3                    5.000e+16   0.0   8.466e+04   !
asC4H10 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!methylbutanoate from LLNL
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
mb4j+h=mb  1.000e+14  0.000  0.0   !1  rnc7: h +fragme
mb3j+h=mb  1.000e+14  0.000  0.0   !1  rnc7: h +fragme
mb2j+h=mb  1.000e+14  0.000  0.0   !1  rnc7*: h +fragm
mbmj+h=mb  1.000e+14  0.000  0.0   !1  rnc7**: h +frag
mp3j+ch3=mb   1.000e+13  0.000  0.0   !1  rnc7: ch3 +frag
c3h7co2+ch3=mb  3.000e+13  0.000  0.0   !1  apdme: ch3o+ch3
me2j+c2h5=mb  8.000e+12  0.000  0.0   !1  rnc7*:larger al
ch3co2+nc3h7=mb  1.810e+13  0.000  0.0   !1  anist: ext lit
c3h7co+ch3o=mb  3.000e+13  0.000  0.0   !1  apdme: ch3o+ch3
mb+c2h3=c2h4+mb4j  5.010e+11  0.000  18000.0   !2  rnc7, primary;
mb+c2h5=c2h6+mb4j  5.010e+10  0.000  13400.0   !2  rnc7, primary;
mb+ch3=ch4+mb4j  4.520e-01  3.650  7154.0   !2  anc7, primary f
mb+ch3o=ch3oh+mb4j  1.581e+11  0.000  7000.0   !2  rnc7, primary;
mb+ch3o2=ch3o2h+mb4j  8.400e+12  0.000  20440.0   !2  corrected to ag
mb+h=h2+mb4j  9.400e+04  2.750  6280.0   !2  anc7, primary f
mb+ho2=h2o2+mb4j  8.400e+12  0.000  20440.0   !2  anc7, primary f
mb+o=oh+mb4j  9.650e+04  2.680  3716.0   !2  anc7, primary f
!mb+o2=ho2+mb4j  3.000e+13  0.000  52800.0   !2  anc7, primary f
mb+o2=ho2+mb4j  2.000e+13   0.0   5.087e+04   !Tsang et al., J. Phys.
Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mb+oh=h2o+mb4j  5.250e+09  0.970  1590.0   !2  rnc7, primary;
mb+mb4oo=mb4ooh+mb4j  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
mb+mb3oo=mb3ooh+mb4j  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
mb+mb2oo=mb2ooh+mb4j  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
mb+mbmoo=mbmooh+mb4j  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
mb+c2h3=c2h4+mb3j  4.000e+11  0.000  16800.0   !2  rnc7, secondary
mb+c2h5=c2h6+mb3j  5.000e+10  0.000  10400.0   !2  rnc7, secondary
mb+ch3=ch4+mb3j  2.705e+04  2.260  7287.0   !2  anc7, secondary
mb+ch3o=ch3oh+mb3j  1.095e+11  0.000  5000.0   !2  anc7, secondary
mb+ch3o2=ch3o2h+mb3j  5.600e+12  0.000  17690.0   !2  corrected to ag
mb+h=h2+mb3j  1.300e+06  2.400  4471.0   !2  anc7, secondary
mb+ho2=h2o2+mb3j  5.600e+12  0.000  17690.0   !2  anc7, secondary
mb+o=oh+mb3j  4.770e+04  2.710  2106.0   !2  anc7, secondary
!mb+o2=ho2+mb3j  2.000e+13  0.000  51050.0   !2  anc7, secondary
mb+o2=ho2+mb3j  4.000e+13   0.0   4.769e+04   !Tsang et al., J. Phys.
Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
mb+oh=h2o+mb3j  4.680e+07  1.610  -35.0   !2  rnc7, secondary
mb+mb4oo=mb4ooh+mb3j  1.867e+12  0.000  17690.0   !2  new reaction pe
mb+mb3oo=mb3ooh+mb3j  1.867e+12  0.000  17690.0   !2  new reaction pe
mb+mb2oo=mb2ooh+mb3j  1.867e+12  0.000  17690.0   !2  new reaction pe
mb+mbmoo=mbmooh+mb3j  1.867e+12  0.000  17690.0   !2  new reaction pe
mb+c2h3=c2h4+mb2j  4.000e+11  0.000  14300.0   !2  rnc7*, tertiary
mb+c2h5=c2h6+mb2j  2.000e+11  0.000  7900.0   !2  anc7, rnc7*, te
mb+ch3=ch4+mb2j  2.000e+11  0.000  7900.0   !2  rnc7, anc7 tert
```

```
mb+ch3o=ch3oh+mb2j  3.800e+10  0.000  2800.0   !2  rnc7, anc7 tert
mb+ch3o2=ch3o2h+mb2j  4.000e+12  0.000  14000.0   !2  same as ho2
mb+h=h2+mb2j  2.520e+14  0.000  7300.0   !2  rnc7, anc7, ter
!mb+h=h2+mb2j  1.000e+14  0.000  7300.0   ! changement Sandro Gail
Sympo2006
mb+ho2=h2o2+mb2j  4.320e+12  0.000  14400.0   !2  rnc7 tertiary
mb+o=oh+mb2j  2.200e+13  0.000  32800.0   !AS MO
!mb+o2=ho2+mb2j  4.000e+13  0.000  41300.0   !2  rnc7 tertiary
mb+o2=ho2+mb2j  4.000e+13  0.000  32800.0   !2  rnc7 tertiary
mb+oh=h2o+mb2j  1.146e+11  0.510  63.0   !2  rnc7, anc7 tert
mb+mb4oo=mb4ooh+mb2j  2.160e+12  0.000  14400.0   !2  new reaction pe
mb+mb3oo=mb3ooh+mb2j  2.160e+12  0.000  14400.0   !2  new reaction pe
mb+mb2oo=mb2ooh+mb2j  2.160e+12  0.000  14400.0   !2  new reaction pe
mb+mbmoo=mbmooh+mb2j  2.160e+12  0.000  14400.0   !2  new reaction pe
mb+c2h3=c2h4+mbmj  5.010e+11  0.000  18000.0   !2  rnc7**, primary
mb+c2h5=c2h6+mbmj  5.010e+10  0.000  13400.0   !2  rnc7**, primary
mb+ch3=ch4+mbmj  4.520e-01  3.650  7154.0   !2  anc7, primary f
mb+ch3o=ch3oh+mbmj  1.581e+11  0.000  7000.0   !2  rnc7**, primary
mb+ch3o2=ch3o2h+mbmj  8.400e+12  0.000  20440.0   !2  corrected to ag
mb+h=h2+mbmj  9.400e+04  2.750  6280.0   !2  anc7, primary f
mb+ho2=h2o2+mbmj  8.400e+12  0.000  20440.0   !2  anc7, primary f
mb+o=oh+mbmj  9.650e+04  2.680  3716.0   !2  anc7, primary f
!mb+o2=ho2+mbmj  3.000e+13  0.000  52800.0   !2  anc7, primary f
mb+o2=mbmj+ho2          2.050e+13   0.0   4.491e+04   !Dayma et al.,
Proc. Combust. Inst.
mb+oh=h2o+mbmj  5.250e+09  0.970  1590.0   !2  rnc7**, primary
mb+mb4oo=mb4ooh+mbmj  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
mb+mb3oo=mb3ooh+mbmj  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
mb+mb2oo=mb2ooh+mbmj  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
mb+mbmoo=mbmooh+mbmj  2.800e+12  0.000  20440.0   !2  new reaction pe
c2h5chco+ch3o=mb2j  5.000e+11  0.000  -1000.0   !3  anc7 :oh+c3h6=c
mb2d+h=mb2j  1.000e+13  0.000  2900.0   !3  rnc7: h to int.
mp2d+ch3=mb2j  1.000e+11  0.000  7600.0   !3  hc descr. of nc
c3h6+ch3co2=mb3j  1.055e+11  0.000  7350.0   !3  anc7:ch3co+c2h4
mb2d+h=mb3j  1.000e+13  0.000  2900.0   !3  rnc7*: h to int
mb3d+h=mb3j  1.000e+13  0.000  1200.0   !3  rnc7: h to term
c2h4+me2j=mb4j  2.000e+11  0.000  7600.0   !3  hc descr. of nc
mb3d+h=mb4j  1.000e+13  0.000  2900.0   !3  rnc7: h to int.
ch2co+ch3o=me2j  5.000e+11  0.000  -1000.0   !3  anc7 :oh+c3h6=c
co+ch3o=ch3co2  1.500e+11  0.000  3000.0   !3  ndme
co2+ch3=ch3co2  1.500e+11  0.000  36730.0   !3  ndme
c2h4+ch3co2=mp3j  2.110e+11  0.000  7350.0   !3  anc7:ch3co+c2h4
mp2d+h=mp3j  1.000e+13  0.000  2900.0   !3  rnc7*: h to int
c2h5chco+h=c3h7co  1.000e+13  0.000  2900.0   !3  rnc7*: h to int
ch2co+c2h5=c3h7co  1.000e+11  0.000  7600.0   !3  hc descr. of nc
c3h7co+ch2o=mbmj  2.002e+12  0.000  24000.0   !3  anist: abs val
mb4j=mb2j  1.786e+09  0.798  31736.3   !5  radicalc, rs fo
mb4j=mb3j  1.639e+10  0.945  39319.5   !5  radicalc, rs fo
mb4j=mbmj  4.547e+09  -0.544  18822.5   !5  radicalc, rs fo
mb3j=mbmj  9.256e+10  -0.654  13897.0   !5  radicalc, rs fo
mb3j=mb2j  1.414e+10  0.862  39467.5   !5  radicalc, rs fo
mb2j=mbmj  8.495e+11  -0.507  21614.5   !5  radicalc, rs fo
mb2d+ch3=c5h7o2+ch4  1.000e+12  0.000  7300.0   !6  anc7
mb3d+ch3=c5h7o2+ch4  1.000e+12  0.000  7300.0   !6  anc7
!mp2d+ch3=>c2h3co+ch2o+ch4  4.520e-01  3.650  7154.0   !6  no allylic
h on
mb2d+h=c5h7o2+h2  3.700e+13  0.000  3900.0   !6  anc7
mb3d+h=c5h7o2+h2  3.700e+13  0.000  3900.0   !6  anc7
!mp2d+h=>c2h3co+ch2o+h2  9.400e+04  2.750  6280.0   !6  no allylic h
on
c5h7o2+oh=mb2d+o  7.000e+11  0.000  29900.0   !6  anc7; deliberat
c5h7o2+oh=mb3d+o  7.000e+11  0.000  29900.0   !6  anc7; deliberat
!mp2d+o=>c2h3co+ch2o+oh  9.650e+04  2.680  3716.0   !6  no allylic h
on
```

```
mb2d+oh=c5h7o2+h2o  3.000e+13  0.000  1230.0   !6  anc7
mb3d+oh=c5h7o2+h2o  3.000e+13  0.000  1230.0   !6  anc7
!mb3d+oh=>mp3j+ch2o  1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !Heyberger et al.,
Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mb3d+oh=>mp3*o+ch3  1.370e+12   0.00 -1.040e+03   !Heyberger et al.,
Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mb2d+ho2=c5h7o2+h2o2  1.500e+11  0.000  14190.0   !6  anc7: c3h6+ho2=
mb3d+ho2=>c5h7o2+h2o2  1.500e+11  0.000  14190.0   !6  anc7: c3h6+ho2
=
!mp2d+ho2=>c2h3co+ch2o+h2o2  8.400e+12  0.000  20440.0   !6  no
allylic h on
mb3d+oh=mb3oh4j  2.760e+12  0.000  -1042.0   !7  pitz propene oh
mb2d+oh=mb2oh3j  2.760e+12  0.000  -1042.0   !7  pitz propene oh
mp2d+oh=mp2oh3j  2.760e+12  0.000  -1042.0   !7  pitz propene oh
mb3oh4j+o2=mb3oh4oo  1.000e+12  0.000  -1100.0   !7  pitz propene oh
mb2oh3j+o2=mb2oh3oo  1.000e+12  0.000  -1100.0   !7  pitz propene oh
mp2oh3j+o2=mp2oh3oo  1.000e+12  0.000  -1100.0   !7  pitz propene oh
mb3oh4oo=>mp3*o+oh+ch2o  1.000e+12  0.000  28680.0   !7
irreversible; p
mb2oh3oo=>me2*o+oh+ch3hco  1.000e+12  0.000  28680.0   !7
irreversible; p
mp2oh3oo=>me2*o+oh+ch2o  1.000e+12  0.000  28680.0   !7
irreversible; p
mb3d+o=mp3j+hco  1.580e+07  1.760  -1216.0   !7  marinov calc fr
mb2d+o=me2j+ch3co  1.580e+07  1.760  -1216.0   !7  marinov calc fr
mp2d+o=me2j+hco  1.580e+07  1.760  -1216.0   !7  marinov calc fr
mb3d+o=me2j+ch2hco  2.505e+07  1.760  76.0   !7  marinov calc fr
mb3d+o=>acrol+h+ch3co2  2.505e+07  1.760  76.0   !7  marinov calc fr
mb2d+o=ch3co2+ch3chcho  5.010e+07  1.760  76.0   !7  marinov calc fr
mp2d+o=ch3co2+ch2hco  5.010e+07  1.760  76.0   !7  marinov calc fr
c5h7o2=ch2chchco+ch3o  2.500e+13  0.000  45000.0   !8  rnc7, anc7
ch2chchco+h=cjhchchco+h2  4.210e-03  4.620  2583.0   !8  anc7: h+c2h4
=h2
ch2chchco+oh=cjhchchco+h2o  1.010e+13  0.000  5955.0   !8  anc7:
oh+c2h4=h
ch2chchco+ch3=cjhchchco+ch4  3.310e+00  3.700  9500.0   !8  anc7: ch3
+c2h4=
ch2chchco+o=cjhchchco+oh  1.200e+11  0.700  8959.0   !8  anc7: c3h6+o
=
ch2chchco+ho2=cjhchchco+h2o2  8.500e+13  0.000  3.043e4   !8  revised
by Pitz
c2h2+hcco=cjhchchco  1.610e+40  -8.580  20331.0   !8  anist, delibera
c2h3+hcco=ch2chchco  8.000e+12  0.000  0.0   !9  rnc7*:larger al
ch2chchco+h=co+ac3h5  1.100e+13  0.000  3400.0   !8  anc7: h+ch2co=c
ch2chchco+h=c2h4+hcco  1.100e+13  0.000  3400.0   !8  anc7: h+ch2co=c
ch2chchco+oh=hcco+ch3hco  3.730e+12  0.000  -1013.0   !8  anc7:
oh+ch2co=
ch2chchco+oh=ch3chcho+co  3.730e+12  0.000  -1013.0   !8  anc7:
oh+ch2co=
ch3+mp2d3j=mb2d  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
c2h3+me2j=mb3d  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
c2h3+ch3co2=mp2d  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
hco+ch3co2=me2*o  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
hco+mp3j=mb4*o  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
nc3h7+chooco=mbm*o  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
hco+chooco=me2*om*o  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
ch2hco+ch3co2=mp3*o  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
hco+me2j*o=mp3*o2*o  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
hco+hco=chocho  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
ch3co+hco=ch3cocho  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
ch3+c2h3co=c2h5chco  1.000e+13  0.000  0.0   !9  ALLARA and shaw
!mb4j+o2=mb4oo  4.500e+12  0.000  0.0   !10  nc7; primary
!mbmj+o2=mbmoo  4.500e+12  0.000  0.0   !10  nc7; primary
!mb3j+o2=mb3oo  7.540e+12  0.000  0.0   !10  nc7; secondary
```

```
!mb2j+o2=mb2oo  1.410e+13  0.000  0.0   !10  nc7; tertiary
mb4oo+mb4j=mb4o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb4oo+mb3j=mb4o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb4oo+mb2j=mb4o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb4oo+mbmj=mb4o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+mb4j=mb3o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+mb3j=mb3o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+mb2j=mb3o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+mbmj=mb3o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+mb4j=mb2o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+mb3j=mb2o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+mb2j=mb2o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+mbmj=mb2o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+mb4j=mbmo+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+mb3j=mbmo+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+mb2j=mbmo+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+mbmj=mbmo+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb4oo+ch3=ch3o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb4oo+c2h5=ch3ch2o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb4oo+ic3h7=ic3h7o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb4oo+nc3h7=nc3h7o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+ch3=ch3o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+c2h5=ch3ch2o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+ic3h7=ic3h7o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb3oo+nc3h7=nc3h7o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+ch3=ch3o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+c2h5=ch3ch2o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+ic3h7=ic3h7o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo+nc3h7=nc3h7o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+ch3=ch3o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+c2h5=ch3ch2o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+ic3h7=ic3h7o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mbmoo+nc3h7=nc3h7o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
c2h5o2+mb2j=ch3ch2o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
c2h5o2+mb3j=ch3ch2o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
c2h5o2+mb4j=ch3ch2o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
c2h5o2+mbmj=ch3ch2o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ch3o2+mb2j=ch3o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ch3o2+mb3j=ch3o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ch3o2+mb4j=ch3o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ch3o2+mbmj=ch3o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ho2+mb2j=oh+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ho2+mb3j=oh+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ho2+mb4j=oh+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ho2+mbmj=oh+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ic3h7o2+mb2j=ic3h7o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ic3h7o2+mb3j=ic3h7o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ic3h7o2+mb4j=ic3h7o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
ic3h7o2+mbmj=ic3h7o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
nc3h7o2+mb2j=nc3h7o+mb2o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
nc3h7o2+mb3j=nc3h7o+mb3o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
nc3h7o2+mb4j=nc3h7o+mb4o  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
nc3h7o2+mbmj=nc3h7o+mbmo  7.000e+12  0.000  -1000.0   !11  anc7
mb2oo=mb2ooh3j  1.088e+12  0.000  29206.5   !12  paper rs values
mb2oo=mb2ooh4j  6.097e+10  0.000  25076.0   !12  paper rs values
mb2oo=mb2oohmj  3.165e+09  0.000  21803.5   !12  paper rs values
mb3oo=mb3ooh2j  2.837e+12  0.000  27789.0   !12  paper rs values
mb3oo=mb3ooh4j  8.669e+11  0.000  30876.0   !12  paper rs values
mb4oo=mb4ooh2j  1.995e+11  0.000  21989.0   !12  paper rs values
mb4oo=mb4ooh3j  1.088e+12  0.000  29206.5   !12  paper rs values
mbmoo=mbmooh2j  1.455e+10  0.000  19189.0   !12  paper rs values
mb4oo+ho2=mb4ooh+o2  1.750e+10  0.000  -3275.0   !13  anc7
mb3oo+ho2=mb3ooh+o2  1.750e+10  0.000  -3275.0   !13  anc7
mb2oo+ho2=mb2ooh+o2  1.750e+10  0.000  -3275.0   !13  anc7
```

```
mbmoo+ho2=mbmooh+o2  1.750e+10  0.000  -3275.0   !13  anc7
mb4oo+h2o2=>mb4ooh+ho2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mb4ooh+ho2=>mb4oo+h2o2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mb3oo+h2o2=>mb3ooh+ho2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mb3ooh+ho2=>mb3oo+h2o2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mb2oo+h2o2=>mb2ooh+ho2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mb2ooh+ho2=>mb2oo+h2o2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mbmoo+h2o2=>mbmooh+ho2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mbmooh+ho2=>mbmoo+h2o2  2.400e+12  0.000  10000.0   !14  anc7;rnc7;
one
mb4oo+ch3o2=>mb4o+ch3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !15  anc7
mb3oo+ch3o2=>mb3o+ch3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !15  anc7
mb2oo+ch3o2=>mb2o+ch3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !15  anc7
mbmoo+ch3o2=>mbmo+ch3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !15  anc7
c2h5o2+mb4oo=>ch3ch2o+mb4o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
c2h5o2+mb3oo=>ch3ch2o+mb3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
c2h5o2+mb2oo=>ch3ch2o+mb2o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
c2h5o2+mbmoo=>ch3ch2o+mbmo+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
ic3h7o2+mb4oo=>ic3h7o+mb4o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irrever
ic3h7o2+mb3oo=>ic3h7o+mb3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irrever
ic3h7o2+mb2oo=>ic3h7o+mb2o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irrever
ic3h7o2+mbmoo=>ic3h7o+mbmo+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irrever
mb2oo+mb2oo=>o2+mb2o+mb2o  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb2oo+mb3oo=>mb2o+mb3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb2oo+mb4oo=>mb2o+mb4o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb2oo+mbmoo=>mb2o+mbmo+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb3oo+mb3oo=>o2+mb3o+mb3o  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb3oo+mb4oo=>mb3o+mb4o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb3oo+mbmoo=>mb3o+mbmo+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb4oo+mb4oo=>o2+mb4o+mb4o  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mb4oo+mbmoo=>mb4o+mbmo+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
mbmoo+mbmoo=>o2+mbmo+mbmo  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irreversi
nc3h7o2+mb4oo=>nc3h7o+mb4o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irrever
nc3h7o2+mb3oo=>nc3h7o+mb3o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irrever
nc3h7o2+mb2oo=>nc3h7o+mb2o+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
irrever
nc3h7o2+mbmoo=>nc3h7o+mbmo+o2  1.400e+16  -1.610  1860.0   !16  anc7;
```

```
irrever
mb4ooh=mb4o+oh  1.500e+16  0.000  42500.0   !17  anc7, primary s
mb3ooh=mb3o+oh  9.450e+15  0.000  41600.0   !17  anc7, secondary
mb2ooh=mb2o+oh  5.950e+15  0.000  42540.0   !17  anc, tertiary s
mbmooh=mbmo+oh  1.500e+16  0.000  42500.0   !17  anc7, primary s
ch2o+mp3j=mb4o  1.500e+11  0.000  11900.0   !18  anc7, alk to te
ch3hco+me2j=mb3o  1.500e+11  0.000  11900.0   !18  anc7, alk to te
me2*o+c2h5=mb2o  1.500e+11  0.000  11900.0   !18  anc7, alk to in
mbm*o+h=mbmo  6.628e+09  1.110  4226.0   !18  anist: calculat
mb4*o+h=mb4o  6.628e+09  1.110  4226.0   !18  anist: calculat
mp3*o+ch3=mb3o  1.500e+11  0.000  11900.0   !18  anc7, alk to in
ethco+ch3co2=mb2o  1.500e+11  0.000  11900.0   !18  anc7, "alk" to
ch2o+c3h7co2=mbmo  1.500e+11  0.000  11900.0   !18  anc7, "alk" to
mb2oohmj=>mbcy2om+oh  9.375e+09  0.000  7000.0   !19  hcn
mb2ooh4j=>mbcy4o2+oh  7.500e+10  0.000  15250.0   !19  hcn
mb2ooh3j=>mbcy3o2+oh  6.000e+11  0.000  22000.0   !19  hcn
mb3ooh2j=>mbcy3o2+oh  6.000e+11  0.000  22000.0   !19  hcn
mb3ooh4j=>mbcy4o3+oh  6.000e+11  0.000  22000.0   !19  hcn
mb4ooh2j=>mbcy4o2+oh  7.500e+10  0.000  15250.0   !19  hcn
mb4ooh3j=>mbcy4o3+oh  6.000e+11  0.000  22000.0   !19  hcn
mbmooh2j=>mbcy2om+oh  9.375e+09  0.000  7000.0   !19  hcn
mb3d+ho2=mb4ooh3j  1.500e+11  0.000  7800.0   !20  anc7
mb2d+ho2=mb3ooh2j  1.500e+11  0.000  7800.0   !20  anc7
mb3d+ho2=mb3ooh4j  1.500e+11  0.000  7800.0   !20  anc7
mb2d+ho2=mb2ooh3j  1.500e+11  0.000  7800.0   !20  anc7
mb2ooh4j=>me2*o+c2h4+oh  5.916e+19  -1.870  30290.0   !21  anc7**
mb4ooh2j=>mp2d+ch2o+oh  1.025e+20  -1.580  33380.0   !21  anc7**
mb2ooh3j+o2=mb2ooh3oo  7.540e+12  0.000  0.0   !22  nc7, secondary
mb2ooh4j+o2=mb2ooh4oo  4.520e+12  0.000  0.0   !22  nc7, primary
mb2oohmj+o2=mb2oohmoo  4.520e+12  0.000  0.0   !22  nc7, primary
mb3ooh2j+o2=mb3ooh2oo  1.410e+13  0.000  0.0   !22  nc7; tertiary
mb3ooh4j+o2=mb3ooh4oo  4.520e+12  0.000  0.0   !22  nc7, primary
mb4ooh2j+o2=mb4ooh2oo  1.410e+13  0.000  0.0   !22  nc7; tertiary
mb4ooh3j+o2=mb4ooh3oo  7.540e+12  0.000  0.0   !22  nc7, secondary
mbmooh2j+o2=mbmooh2oo  1.410e+13  0.000  0.0   !22  nc7; tertiary
mb2ooh3oo=mb3ooh2*o+oh  1.419e+12  0.000  26151.0   !23  as in ro2
isome
mb2ooh4oo=mb4ooh2*o+oh  9.976e+10  0.000  20351.0   !23  as in ro2
isome
mb2oohmoo=mbmooh2*o+oh  7.275e+09  0.000  20190.7   !23  as in ro2
isome
mb3ooh2oo=mb2ooh3*o+oh  5.440e+11  0.000  27915.0   !23  as in ro2
isome
mb3ooh4oo=mb4ooh2d+ho2  1.995e+11  0.000  20351.0   !23  as in ro2
isome
mb3ooh4oo=mb4ooh3*o+oh  5.440e+11  0.000  26151.0   !23  as in ro2
isome
mb4ooh2oo=mb4ooh2d+ho2  1.088e+12  0.000  29206.5   !23  as in ro2
isome
mb4ooh2oo=mb2ooh4*o+oh  4.065e+10  0.000  21863.0   !23  as in ro2
isome
mb4ooh3oo=mb4ooh2d+ho2  2.837e+12  0.000  26151.0   !23  as in ro2
isome
mb4ooh3oo=mb3ooh4*o+oh  5.779e+11  0.000  27663.0   !23  as in ro2
isome
mbmooh2oo=mbmooh2d+ho2  1.088e+12  0.000  31846.2   !23  as in ro2
isome
mbmooh2oo=mb2oohm*o+oh  2.110e+09  0.000  21703.0   !23  as in ro2
isome
mb2ooh3oo=>mb3ooh2oo  7.275e+09  0.000  12700.0   !23  as in ro2
isome !!!***
mb3ooh4oo=>mb4ooh3oo  7.275e+09  0.000  12700.0   !23  as in ro2
isome !!!***
mb4ooh2*o=>ch2o+mp3j2*o+oh  1.500e+16  0.000  42000.0   !24a  anc7
prim
mb4ooh2d=>ch2o+mp2d3j+oh  1.500e+16  0.000  42000.0   !24a  anc7 prim
mb4ooh3*o=>ch2o+mp3j*o+oh  1.500e+16  0.000  42000.0   !24a  anc7
prim
mbmooh2*o=>ch2o+baoj2*o+oh  1.500e+16  0.000  42000.0   !24a  anc7
prim*
mbmooh2d=>ch2o+baoj2d+oh  1.500e+16  0.000  42000.0   !24a  anc7
prim*
mb3ooh2*o=>mp3*o2*o+ch3+oh  1.050e+16  0.000  41600.0   !24a  anc7
sec
mb3ooh4*o=>me2j+chocho+oh  1.050e+16  0.000  41600.0   !24a  anc7 sec
mb2ooh3*o=>ch3co+me2*o+oh  5.250e+15  0.000  41600.0   !24a  anc7
sec*
mb2ooh3*o=>ch3cocho+ch3co2+oh  5.250e+15  0.000  41600.0   !24a  anc7
sec*
mb2ooh4*o=>me2*o+ch2hco+oh  1.050e+16  0.000  41600.0   !24a  anc7
sec*
mb2oohm*o=>me2*om*o+c2h5+oh  1.050e+16  0.000  41600.0   !24a  anc7
sec*
mbcy2om+h=>co2+sc3h5och2+h2  4.800e+08  1.500  2005.0   !25  dbr, see
sheet
mbcy2om+oh=>co2+sc3h5och2+h2o  2.400e+06  2.000  -1192.2   !25  dbr,
see shee
mbcy2om+ho2=>co2+sc3h5och2+h2o2  4.000e+12  0.000  13261.0   !25  my
evans-po
mbcy2om+h=>ch2o+c2h5coco+h2  2.400e+08  1.500  2005.0   !25  dbr, see
sheet
mbcy2om+oh=>ch2o+c2h5coco+h2o  1.200e+06  2.000  -1192.2   !25  dbr,
see shee
mbcy2om+ho2=>ch2o+c2h5coco+h2o2  2.000e+12  0.000  13261.0   !25  my
evans-po
mbcy4o2+h=>mp2d+hco+h2  4.800e+08  1.500  2785.0   !25  dbr, see
sheet
mbcy4o2+oh=>mp2d+hco+h2o  2.400e+06  2.000  -1192.2   !25  dbr, see
sheet
mbcy4o2+ho2=>mp2d+hco+h2o2  4.000e+12  0.000  14398.0   !25  my
evans-polyan
mbcy4o2+h=>c2h4+me2j*o+h2  2.400e+08  1.500  2005.0   !25  dbr, see
sheet
mbcy4o2+oh=>c2h4+me2j*o+h2o  1.200e+06  2.000  -1192.2   !25  dbr,
see sheet
mbcy4o2+ho2=>c2h4+me2j*o+h2o2  2.000e+12  0.000  13261.0   !25  my
evans-poly
mbcy3o2+h=>ch3chco+ch3co2+h2  4.800e+08  1.500  2005.0   !25  dbr,
see sheet
mbcy3o2+oh=>ch3chco+ch3co2+h2o  2.400e+06  2.000  -1192.2   !25  dbr,
see she
mbcy3o2+ho2=>ch3chco+ch3co2+h2o2  4.000e+12  0.000  13261.0   !25  my
evans-p
mbcy4o3+h=>ch2o+mp2d3j+h2  4.800e+08  1.500  2875.0   !25  dbr, see
sheet
mbcy4o3+oh=>ch2o+mp2d3j+h2o  2.400e+06  2.000  -1192.2   !25  dbr,
see sheet
mbcy4o3+ho2=>ch2o+mp2d3j+h2o2  4.000e+12  0.000  14398.0   !25  my
evans-poly
mbcy4o3+h=>ch2co+me2j+h2  4.800e+08  1.500  2005.0   !25  dbr, see
sheet
mbcy4o3+oh=>ch2co+me2j+h2o  2.400e+06  2.000  -1192.2   !25  dbr, see
sheet
mbcy4o3+ho2=>ch2co+me2j+h2o2  4.000e+12  0.000  13261.0   !25  my
evans-polya
me2*o+h=me2j*o+h2  4.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7; aldehydic
mb4*o+h=mb4j*o+h2  4.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7; aldehydic
mbm*o+h=mbmj*o+h2  4.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7; aldehydic
me2*om*o+h=me2j*om*o+h2  4.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7;
aldehydic
me2*om*o+h=me2*omj*o+h2  4.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7;
aldehydic
mp3*o+h=mp3j*o+h2  4.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7; aldehydic
mp3*o2*o+h=mp3j*o2*o+h2  4.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7;
aldehydic
chocho+h=cocho+h2  8.000e+13  0.000  4200.0   !26  anc7; aldehydic
me2*o+oh=me2j*o+h2o  2.690e+10  0.760  -340.0   !26  anc7: aldehydic
mb4*o+oh=mb4j*o+h2o  2.690e+10  0.760  -340.0   !26  anc7: aldehydic
mbm*o+oh=mbmj*o+h2o  2.690e+10  0.760  -340.0   !26  anc7: aldehydic
me2*om*o+oh=me2j*om*o+h2o  2.690e+10  0.760  -340.0   !26  anc7:
aldehydic
me2*om*o+oh=me2*omj*o+h2o  2.690e+10  0.760  -340.0   !26  anc7:
aldehydic
mp3*o+oh=mp3j*o+h2o  2.690e+10  0.760  -340.0   !26  anc7: aldehydic
mp3*o2*o+oh=mp3j*o2*o+h2o  2.690e+10  0.760  -340.0   !26  anc7:
aldehydic
me2*o+o=me2j*o+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7; aldehydic
mb4*o+o=mb4j*o+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7; aldehydic
mbm*o+o=mbmj*o+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7; aldehydic
me2*om*o+o=me2j*om*o+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7;
aldehydic
me2*om*o+o=me2*omj*o+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7;
aldehydic
mp3*o+o=mp3j*o+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7; aldehydic
mp3*o2*o+o=mp3j*o2*o+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7;
aldehydic
ch3cocho+o=ch3coco+oh  5.000e+12  0.000  1790.0   !26  anc7;
aldehydic
me2*o+ch3=me2j*o+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7: aldehydic
mb4*o+ch3=mb4j*o+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7: aldehydic
mbm*o+ch3=mbmj*o+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7: aldehydic
me2*om*o+ch3=me2j*om*o+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7:
aldehydic
me2*om*o+ch3=me2*omj*o+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7:
aldehydic
mp3*o+ch3=mp3j*o+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7: aldehydic
mp3*o2*o+ch3=mp3j*o2*o+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7:
aldehydic
ch3cocho+ch3=ch3coco+ch4  1.700e+12  0.000  8440.0   !26  anc7:
aldehydic
me2*o+ho2=me2j*o+h2o2  2.800e+12  0.000  13600.0   !26  anc7:
aldehydic
mb4*o+ho2=mb4j*o+h2o2  2.800e+12  0.000  13600.0   !26  anc7:
aldehydic
mbm*o+ho2=mbmj*o+h2o2  2.800e+12  0.000  13600.0   !26  anc7:
aldehydic
me2*om*o+ho2=me2j*om*o+h2o2  2.800e+12  0.000  13600.0   !26  anc7:
aldehydic
me2*om*o+ho2=me2*omj*o+h2o2  2.800e+12  0.000  13600.0   !26  anc7:
aldehydic
mp3*o+ho2=mp3j*o+h2o2  2.800e+12  0.000  13600.0   !26  anc7:
aldehydic
mp3*o2*o+ho2=mp3j*o2*o+h2o2  2.800e+12  0.000  13600.0   !26  anc7:
aldehydic
co2+c2h5co=baoj2*o  1.000e+11  0.000  30850.0   !27  since reaction
co2+sc3h5=baoj2d  1.000e+11  0.000  9200.0   !27  hc descr. of nc
co+c2h5co=c2h5coco  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
chooco+co=me2j*om*o  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
hco+co=cocho  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
mp3j+co=mb4j*o  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
c3h7co2+co=mbmj*o  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
cocho+co2=me2*omj*o  1.500e+11  0.000  36730.0   !27  andme: co2+ch3=
ch3co2+co=me2j*o  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
!c2h2+ch3co2=mp2d3j  1.610e+40  -8.580  20331.0   !27  anist,
delibera
co+me2j=mp3j*o  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
ch2co+ch3co2=mp3j*o  1.000e+11  0.000  7600.0   !27  hc descr. of nc
me2j*o+co=mp3j*o2*o  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
ch2co+ch3co2=mp3j2*o  1.000e+11  0.000  9200.0   !27  hc descr. of nc
ch2o+sc3h5=sc3h5och2  7.500e+10  0.000  36730.0   !27  andme: co2+ch3
=
ocho+co=chooco  1.500e+11  0.000  3000.0   !27  andme: co+ch3o=
hco+co2=chooco  1.500e+11  0.000  36730.0   !27  andme: co2+ch3=
ch3o+ch3oh = ch2oh+ch3oh 3.000E+11 0.00 4.074E+03
          rev / 1.549E+05 1.68 1.050E+04 /
c2h5oh+c2h5 = pc2h4oh+c2h6 5.000E+10 0.00 1.340E+04
          rev / 6.995E+10 0.00 2.699E+04 /
c2h5oh+c2h5 = ch3choh+c2h6 5.000E+10 0.00 1.040E+04
          rev / 6.995E+10 0.00 2.399E+00 /
c2h2+ch3 = ac3h4+h 6.740E+19 -2.08 3.159E+04
          rev / 1.149E+16 -0.70 1.579E+04 /
c3h6 = ac3h5+h 2.010E+61 -13.26 1.185E+05
          rev / 4.887E+56 -12.25 2.808E+04 /
!*****************************************************************
*********************************************
!******************  changes
RAMIREZ*****************************************************************
******************
!*****************************************************************
*********************************************
phch2+o2 => phhco+oh                      3.760e+15   -1.550
11321.70
phch2+o2 => c6h5o+ch2o                    6.260e+37   -8.860
16582.22
phch3ch2+o => phch3hco+h                  4.370e+18   -1.340
1591.78
phch3ch2+o => c6h4ch3+ch2o                5.990e+23   -2.470
16192.64
phch3ch2+o => toluen+hco                  1.970e+22   -2.360
8152.49
phch3ch2+o2 => phch3hco+oh                1.380e+02    2.420
7440.25
phch3ch2+o2 => oc6h4ch3+ch2o              6.570e+03    1.870
5002.39

phch3ch3 = c6h4ch3+ch3                   4.320e+29   -3.580
110164.91
phch3ch2+h = c6h4ch3+ch3                 5.830e+67  -14.150  68329.35
phch3ch2+ho2 => c6h4ch3+ch2o+oh          3.130e+18   -1.440  13943.59
phch3hco => c6h4ch3+co+h                 2.100e+16    0.000  81739.96
phch3hco+h => c6h4ch3+co+h2              4.090e+09    1.160   2404.40
phch3hco+o => c6h4ch3+co+oh              5.840e+12    0.000   1809.27
phch3hco+oh => c6h4ch3+co+h2o            2.890e+08    1.350  -1572.66
phch3hco+o2 => c6h4ch3+co+ho2            1.200e+05    2.500  37554.97
phch3hco+ho2 => c6h4ch3+co+h2o2          4.090e+04    2.500  10203.15
phch3hco+ch3 => c6h4ch3+co+ch4           3.490e-08    6.210
1630.02!

!!!!!!!!!!!!!!c10h7ch3+o => napht+co+2h                     1.100e+13
0.000   4531.55
!!!!!!!!!!!!!!c10h7ch3+o => indenyl+ch3+co                  1.470e+13
0.000   4531.55

c10h7ch2+o2 = c10h7hco+oh                      3.760e+15   -1.550
11321.70
c10h7ch2+o2 = A2-X+ch2o+o                      6.32E+11     0.00
```

```
14500.0
c10h7ch2+ho2=c10h7ch2o+oh                          2.00E+11     0.00  00.0

c10h7ch2o = A2-X+ch2o                          1.300E+14    0.00
1100.0 ! idem phch2o=phhco+H

indenoxy+h=indenyl+oh                     1.500e+13    0.00       0.0 !
18/10/04

phch2o+oh=>phhco+h2o                           1.716E+09      1.18    -
447.0 ! Tsang-hampson 1986

c6h5oh+c2h2=>ASTYRYL+oh      3.210E+13    0.00    8910.0 !(EmD/BRE
92) c6h5oh+h=c6h6+oh
c6h6+mo8j=>mo+c6h5        3.00E+12 0 14000
c6h6+mo7j=>mo+c6h5        3.00E+12 0 14000
c6h6+mo6j=>mo+c6h5        3.00E+12 0 14000
c6h6+mo5j=>mo+c6h5        3.00E+12 0 14000
c6h6+mo4j=>mo+c6h5        3.00E+12 0 14000
!c2h2+o+h2=>ch3hco         4.210E+13    0.00    410.0
!acrol=>c2h4+co             2.450E+16    0.00   44128.0 !
A2oh+c2h6=>napht+oh+c2h5         18.210E+14    0.00    16410.0 !
(EmD/BRE 92)c6h5oh+h=c6h6+oh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
A2oh+c6h6=>napht+oh+c6h5         12.210E+14    0.00    12510.0 !
(EmD/BRE 92)c6h5oh+h=c6h6+oh
!A2oh+c2h2=>napht+oh+c2h       2.230E+13    0.00     17410.0!
!ch2o+c2h2=ch3hco+C           6.210E+13    0.00    27410.0
!c2h4=c2h2+h2            3.200E+13      0.0         0.0

acrol=c2h4+co           2.450E+12    0.00   67128.0 !
A2oh+o=indenoxy+hco         4.210E+13    0.00    2410.0 !(EmD/BRE 92)
c6h5oh+h=c6h6+oh

Ac7h15+toluen=phch2+nc7h16           1.00E+11 0 12000
Bc7h15+toluen=phch2+nc7h16           1.00E+11 0 12000
Cc7h15+toluen=phch2+nc7h16           1.00E+11 0 12000
Dc7h15+toluen=phch2+nc7h16          1.00E+11 0 12000

c7h15qjA+toluen=c7h15qA+phch2       4.00E+11 0 14000
c7h15qjB+toluen=c7h15qC+phch2       4.00E+11 0 14000
c7h15qjD+toluen=c7h15qD+phch2       4.00E+11 0 14000

c6h5+nc7h16=Ac7h15+c6h6          9.00E+11 0 15000!
c6h5+nc7h16=Bc7h15+c6h6          9.00E+11 0 15000! 2.00E+11 0 12500
c6h5+nc7h16=Cc7h15+c6h6          9.00E+11 0 15000! 1.00E+11 0 10000
c6h5+nc7h16=Dc7h15+c6h6          9.00E+11 0 15000! 6.00E+11 0 15000

c7h14-1+phch2=Cc7h13-1+toluen       1.00E+11 0 17000
c7h14-2+phch2=Dc7h13-1+toluen             1.00E+11 0 17000
c7h14-3+phch2=Ac7h13-3+toluen             1.00E+11 0 17000

c10h20-1+c10h7ch2=Cc10h19-1+c10h7ch3            1.00E+11 0 17000
c10h20-2+c10h7ch2=Dc10h19-2+c10h7ch3            1.00E+11 0 17000
c10h20-3+c10h7ch2=Ec10h19-3+c10h7ch3            1.00E+11 0 17000
c10h20-4+c10h7ch2=Fc10h19-4+c10h7ch3            1.00E+11 0 17000

c7h15qjA+phhco=phco+c7h15qA               3.00E+12 0 9000
c7h15qjB+phhco=phco+c7h15qA         3.00E+12 0 9000
c7h15qjC+phhco=phco+c7h15qA         3.00E+12 0 9000
c7h15qjD+phhco=phco+c7h15qA         3.00E+12 0 9000

Ac8h17+toluen=phch2+nc8h18          2.00E+11 0 14000
Bc8h17+toluen=phch2+nc8h18          1.00E+11 0 12000
```

```
Cc8h17+toluen=phch2+nc8h18          1.00E+11 0 12000
Dc8h17+toluen=phch2+nc8h18          1.00E+11 0 12000

c6h5+nc8h18=Ac8h17+c6h6             9.00E+11 0 15500
c6h5+nc8h18=Bc8h17+c6h6             9.00E+11 0 15500
c6h5+nc8h18=Cc8h17+c6h6             9.00E+11 0 15500
c6h5+nc8h18=Dc8h17+c6h6             9.00E+11 0 15500

c10h21ojA+A2oh=>napht+c10h20rDqA      3.00E+12    0.00   0.0! 6.00E+
08    0.00    0.0 ! C6H5OH+C4H5-I=C4H613+C6H5O
c10h21ojB+A2oh=>napht+c10h20rAqB      3.00E+12    0.00   0.0! 6.00E+
08    0.00    0.0 ! C6H5OH+C4H5-I=C4H613+C6H5O
c10h21ojC+A2oh=>napht+c10h20rAqC      3.00E+12    0.00   0.0! 6.00E+
08    0.00    0.0 ! C6H5OH+C4H5-I=C4H613+C6H5O
c10h21ojD+A2oh=>napht+c10h20rAqD      3.00E+12    0.00   0.0! 6.00E+
08    0.00    0.0 ! C6H5OH+C4H5-I=C4H613+C6H5O
c10h21ojE+A2oh=>napht+c10h20rAqE      3.00E+12    0.00   0.0! 6.00E+
08    0.00    0.0 ! C6H5OH+C4H5-I=C4H613+C6H5O

!hcco+o2=hco+co+o        9.78E+11 0 850! MARINOV 1998
hcco+oh=c2o+h2o               3.00E+13 0 0! MARINOV 1998
!ch2o+ch3o=>ch3hco+oh    4.21E+13   0     7410!   1.15E+11  0.00
1280.0! CH3O+CH2O=CH3OH+HCO
!c2h2+c2h6=>c2h4+c2h4         2.00E+11 0 13000
oc6h4ch3=c6h6+h+co                      2.51E+11 0 43900!
!ch2o+ch3=ch3hco+h                    7.800E-08      6.10    1970.0!

!A2oh+c2h2=>A2R5+oh+h         1.210E+15    0.00    8910.0 !(EmD/BRE
92) c6h5oh+h=c6h6+oh
A2oh+Ac10h21=>napht+oh+c10h20-1         1.00E+11     0.00    9500.0!
c6h5oh+c6h5ch2=c6h50+c6h5ch3
A2oh+Bc10h21=>napht+oh+c10h20-2         1.00E+11     0.00    9500.0!
c6h5oh+c6h5ch2=c6h50+c6h5ch3
A2oh+Cc10h21=>napht+oh+c10h20-3         1.00E+11     0.00    9500.0!
c6h5oh+c6h5ch2=c6h50+c6h5ch3
A2oh+Dc10h21=>napht+oh+c10h20-4         1.00E+11     0.00    9500.0!
c6h5oh+c6h5ch2=c6h50+c6h5ch3
A2oh+Ec10h21=>napht+oh+c10h20-5         1.00E+11    0.00    9500.0!
c6h5oh+c6h5ch2=c6h50+c6h5ch3

!c2h2+o2=>co+2h+co                           1.980E+04    2.60
656.0 !(87mAh/FONT 0.3)
c10h21qjA+phhco=>phco+c10h21qA   3.00E+12    0.00   9000.0!
c10h21qjB+phhco=>phco+c10h21qB   3.00E+12    0.00   9000.0!
c10h21qjC+phhco=>phco+c10h21qC   3.00E+12    0.00   9000.0!
c10h21qjD+phhco=>phco+c10h21qD   3.00E+12    0.00   9000.0!
c10h21qjE+phhco=>phco+c10h21qE   3.00E+12    0.00   9000.0!
!napht+c10h21ojA=>oh+A2-X+Ac10h21  8.200E+08  0.00  11800.0!
!napht+c10h21ojB=>oh+A2-X+Ac10h21  6.200E+08  0.00  11800.0!
!napht+c10h21ojC=>oh+A2-X+Ac10h21  6.200E+08  0.00  11800.0!
!napht+c10h21ojD=>oh+A2-X+Ac10h21  6.200E+08  0.00  11800.0!
!napht+c10h21ojE=>oh+A2-X+Ac10h21  6.200E+11  0.00  11800.0!
A2R5+o2=>A2-X+2co+h                     9.570e+20   -2.270   7189.29!
napht+o2=>indenoxy+co+h                      3.000e+13    0.000
8981.84

Ac10h21+o2=c10h21qjA                        4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
Bc10h21+o2=c10h21qjB                        7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Cc10h21+o2=c10h21qjC                        7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Dc10h21+o2=c10h21qjD                        7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
```

```
Ec10h21+o2=c10h21qjE                        7.540e+12   0.000   00000.0
      !10

Ac9h19+o2=c9h19qjA                          4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
Bc9h19+o2=c9h19qjB                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Cc9h19+o2=c9h19qjC                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Dc9h19+o2=c9h19qjD                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Ec9h19+o2=c9h19qjE                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Ac8h17+o2=c8h17qjA                          4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
Bc8h17+o2=c8h17qjB                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Cc8h17+o2=c8h17qjC                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Dc8h17+o2=c8h17qjD                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Ac7h15+o2=c7h15qjA                          4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
Bc7h15+o2=c7h15qjB                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Cc7h15+o2=c7h15qjC                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Dc7h15+o2=c7h15qjD                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Ac6h13+o2=c6h13qjA                          4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
Bc6h13+o2=c6h13qjB                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Cc6h13+o2=c6h13qjC                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Ac5h11+o2=c5h11qjA                          4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
Bc5h11+o2=c5h11qjB                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
Cc5h11+o2=c5h11qjC                          7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
!pc4h9+o2=pc4h9o2                           4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!sc4h9+o2=sc4h9o2                           7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
!
!
mo8j+o2=mo8oo                               4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
mo7j+o2=mo7oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mo6j+o2=mo6oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mo5j+o2=mo5oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mo4j+o2=mo4oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mo3j+o2=mo3oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mo2j+o2=mo2oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
momj+o2=momoo                               4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!
```

```
mhp7j+o2=mhp7oo                             4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
mhp6j+o2=mhp6oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhp5j+o2=mhp5oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhp4j+o2=mhp4oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhp3j+o2=mhp3oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhp2j+o2=mhp2oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhpmj+o2=mhpmoo                             4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!
mhx6j+o2=mhx6oo                             4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
mhx5j+o2=mhx5oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhx4j+o2=mhx4oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhx3j+o2=mhx3oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhx2j+o2=mhx2oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mhxmj+o2=mhxmoo                             4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!
mpe5j+o2=mpe5oo                             4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
mpe4j+o2=mpe4oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mpe3j+o2=mpe3oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mpe2j+o2=mpe2oo                             7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mpemj+o2=mpemoo                             4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!
mb4j+o2=mb4oo                               4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
mb3j+o2=mb3oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mb2j+o2=mb2oo                               7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
mbmj+o2=mbmoo                               4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!
!mp3j+o2=mp3oo                              4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!mp2j+o2=mp2oo                              7.540e+12   0.000   00000.0
      !10
!mpmj+o2=mpmoo                              4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!
me2j+o2=me2oo                               4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
memj+o2=memoo                               4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
!
!ch3co2+o2=ch3ocooo                         4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
c9h19co+o2=c9h19cooo                        4.520e+12   0.000   00000.0
      !10
```

```
c10h20qjBqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjCqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjDqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjEqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!

c10h20qjAqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjCqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjDqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjEqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjFqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!

c10h20qjAqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjBqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjDqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjEqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjFqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjGqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!

c10h20qjAqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjBqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjCqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjEqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjFqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjGqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjHqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!

c10h20qjAqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjBqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjCqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjDqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjFqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjGqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjHqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
!
c10h20qjIqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2     7.0E+15   0.00       42065.0
```

```
!


END

!//////////////////////////////////Bloc pression 1
atm/////////////////////////////////////////////////

ch3+oh=ch2oh+h                          2.640E+19   -1.80    8068.0 !
(DEAN,1BAR 87)
ch3+oh=ch3o+h                           5.740E+12   -0.23   13931.0 !
(DEAN,1BAR 87)
ch3+oh=sch2+h2o                         7.200E+13    0.00    2780.0
ch3+oh=ch2o+h2                          3.190E+12   -0.53   10810.0 !
(DEAN,1BAR 87)

c2h5+o2=c2h4+ho2                        3.000E+20   -2.86    6761.0 !
(90BoZ/D,1Bar)
c2h5+o2=c2h4o2h                         1.300E+40   -9.41   11026.0 !
(90BoZ/D,1Bar)
c2h5+o2=ch3hco+oh                       1.600E+14   -1.17   10391.0 !
(90BoZ/D,1Bar)

c2h3+o2=ch2hco+o                        1.447E+15   -0.78    3135.0 !
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=ch2o+hco                        1.853E+23   -3.29    3892.0 !
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=chocho+h                        1.910E+18   -2.25    2398.0 !
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=c2h2+ho2                        5.190E+15   -1.26    3310.0 !
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441

c3h3+c3h3=c6h5+h                        1.697E+48   -9.977  36755.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=c6h6                          3.160E+55  -12.55   22264.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=FULVENE                       6.306E+59  -13.80   24953.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       2.5a51E+32   -6.352   5432.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       5.492E+62  -14.73   25602.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       3.018E+35   -7.37    5963.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate

FULVENE=c6h6                            1.445E+45   -8.90   96999.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
FULVENE=c6h5+h                          2.239E+68  -14.65  142570.0 !
1atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799

nc4h5+c2h2=c6h6+h                       7.829E+15   -1.00    8901.0 !
1atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
nc4h5+c2h2=FULVENE+h                    4.625E+15   -0.89    9143.0 !
1atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=c6h6+h                       1.668E+23   -3.30   24961.0 !
1atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=FULVENE+h                    6.805E+24   -3.45   20339.0 !
1atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
```

```
!//////////////////////////////////Bloc pression 10
atm/////////////////////////////////////////////////

c2h3+o2=ch2hco+o                        1.176E+17   -1.36    5580.0 !
10 atm divided by 3 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-
4441
c2h3+o2=ch2o+hco                        9.275E+25   -3.96    7043.0 !
10 atm times 2.5 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=chocho+h                        7.780E+20   -2.94    5541.0 !
10 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
!c2h3+o2=c2h2+ho2                        3.250E+19   -2.26    7932.0 !
10 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441

ch3+oh=ch2oh+h                          1.990E+19   -1.68   11157.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=ch3o+h                           9.950E+14   -0.82   16872.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=sch2+h2o                         6.370E+18   -1.67   11141.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=ch2o+h2                          7.390E+14   -1.13   14551.0 !
(DEAN,10BAR 87)

c2h5+o2=c2h4+ho2                        1.010E+31   -5.81   15860.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
c2h5+o2=c2h4o2h                         2.370E+42   -9.65   16150.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
c2h5+o2=ch3hco+oh                       6.930E+17   -2.171  14020.0 !
(90BoZ/D,10Bar)

c3h3+c3h3=c6h5+h                        3.671E+26   -3.879  28960.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=c6h6                          3.888E+50  -11.01   20320.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=FULVENE                       1.071E+61  -13.96   28084.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       3.204E+28   -5.043   4517.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       5.620E+60  -13.93   27093.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       7.975E+29   -5.50    4665.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate

FULVENE=c6h6                            2.951E+31   -4.97   88465.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
FULVENE=c6h5+h                          8.511E+24   -2.505 113330.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799

nc4h5+c2h2=c6h6+h                       1.690E+16   -1.03    8968.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
nc4h5+c2h2=FULVENE+h                    1.740E+19   -1.86   12384.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=c6h6+h                       8.250E+24   -3.76   26565.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=FULVENE+h                    9.738E+26   -3.76   21329.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747

!//////////////////////////////////Bloc pression 100
atm/////////////////////////////////////////////////
```

```
c2h3+o2=ch2hco+o                        5.270E+21   -2.44   11329.0 !
100 atm /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=ch2o+hco                        1.010E+28   -4.54   12197.0 !
100 atm times 2.5 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-
4441
c2h3+o2=chocho+h                        8.900E+23   -3.70   11082.0 !
100 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441
c2h3+o2=c2h2+ho2                        3.610E+23   -3.26   16383.0 !
100 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem,vol.97,pp.4427-4441

ch3+oh=ch2oh+h                          1.990E+19   -1.68   11157.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=ch3o+h                           9.950E+14   -0.82   16872.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=sch2+h2o                         6.370E+18   -1.67   11141.0 !
(DEAN,10BAR 87)
ch3+oh=ch2o+h2                          7.390E+14   -1.13   14551.0 !
(DEAN,10BAR 87)

c2h5+o2=c2h4+ho2                        1.010E+31   -5.81   15860.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
c2h5+o2=c2h4o2h                         2.370E+42   -9.65   16150.0 !
(90BoZ/D,10Bar)
c2h5+o2=ch3hco+oh                       6.930E+17   -2.171  14020.0 !
(90BoZ/D,10Bar)

c3h3+c3h3=c6h5+h                        3.671E+26   -3.879  28960.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=c6h6                          3.888E+50  -11.01   20320.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
c3h3+c3h3=FULVENE                       1.071E+61  -13.96   28084.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       3.204E+28   -5.043   4517.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       5.620E+60  -13.93   27093.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate
c3h3+c3h3=FULVENE                       7.975E+29   -5.50    4665.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
duplicate

FULVENE=c6h6                            2.951E+31   -4.97   88465.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799
FULVENE=c6h5+h                          8.511E+24   -2.505 113330.0 !
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799

nc4h5+c2h2=c6h6+h                       1.690E+16   -1.03    8968.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
nc4h5+c2h2=FULVENE+h                    1.740E+19   -1.86   12384.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=c6h6+h                       8.250E+24   -3.76   26565.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
ic4h5+c2h2=FULVENE+h                    9.738E+26   -3.76   21329.0 !
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747
```

Résumé

L'oxydation d'un gazole commercial et d'un gazole modèle (70% *n*-décane/30% 1-méthylnaphtalène en mol), ainsi que l'oxydation d'un carburant B30 « réel » (30% EMHV en vol.) et d'un B30 modèle (49% de n-décane, 21% de 1-méthylnaphtalène et 30% d'octanoate de méthyle en mole), a été étudiée dans un réacteur auto-agité par jets gazeux, un tube à choc et une bombe sphérique. Les études ont été effectuées dans un réacteur auto-agité en silice fondue, dans les mêmes conditions expérimentales initiales (560-1030 K, à 6 et 10 bar, à des richesses allant de 0,25 à 1,5). Les résultats de cette série d'expériences sont constitués de profils de concentration des espèces intermédiaires stables et des produits de combustion mesurés en fonction de la température, après prélèvement à basse pression par une sonde sonique, par infrarouge et par chromatographie en phase gazeuse. Les résultats obtenus avec les « carburants réels » ainsi qu'avec les carburants modèles (gazole et B30) ont été comparés, montrant que les carburants modèles sont d'excellents substituts simplifiés pour les « carburants réels » gazole et B30. Nous avons mesuré des délais d'auto-inflammation du carburant modèle B30 dans un tube à choc à haute pression dans une large gamme de conditions expérimentales (20 et 40 bar, intervalle de richesse de 0.5 à 1.5, et températures allant de 700 à 1200 K). Les vitesses fondamentales de flammes de 1-méthylnaphtalène, de l'octanoate de méthyle, et des carburants modèles gazole et B30 ont été mesurées dans une bombe sphérique, sous différentes conditions expérimentales (une pression initiale de 1 et 4 bar, une température initiale de 423K et une large gamme de richesses). Un mécanisme détaillé a été développé, validé, puis été réduit. Il prédit raisonnablement les données expérimentales obtenues en bombe sphérique dans cette étude.

TITLE: Expérimental and et modeling study of the kinetics of oxidation , ignition and combustion of Diesel and biodiesel fuels.

ABSTRACT:

The oxidation of a commercial Diesel fuel and a Diesel surrogate fuel (70% n-decane/30% 1-methylnaphthalene in mole), a commercial B30 biodiesel fuel (30% FAME by vol.), and a B30 biodiesel surrogate fuel (49% *n*-decane, 21% 1-methylnaphthalene and 30% methyl octanoate, in mole) was studied using a jet-stirred reactor, a shock tube, and a spherical bomb. Experiments were performed in a fused-silica jet-stirred reactor under the same initial conditions (560–1030 K, 6 and 10 bar, equivalence ratios of 0.25–1.5). The results of this series of experiments consisted of concentration profiles of reactants, stable intermediates and products measured as a function of temperature by low-pressure probe sampling followed by Fourier transform infrared absorption spectrometry and gas chromatography analyses. The results obtained with the commercial and surrogate mixtures (diesel and B30 fuel) were compared with each other, showing that the fuel surrogates are excellent and simple fuel representatives. Ignition delay times of B30 surrogate fuels were measured in a high-pressure shock tube over a wide range of experimental conditions (pressures of 20 and 40 bar, equivalence ratios in the range 0.5–1.5, and temperatures ranging from 700 to 1200 K). Laminar flame speeds of 1-methylnaphthalene, methyl octanoate, Diesel surrogate (70% n-decane and 21% 1-methylnaphthalene in mole) and a B30 bio-Diesel surrogate have been investigated in a stainless steel spherical bomb under different experimental conditions (pressures of 1 and 4 bar, a temperature of 423K and a wide equivalence ratios range). A detailed chemical kinetic mechanism was developed, validated and reduced. It predicts reasonably well the present experimental results.

DISCIPLINE: Chimie

MOTS CLES: Biocarburants, Diesel, réacteur auto-agité, tube à choc, flamme, modélisation, cinétique

INSTITUT DE COMBUSTION, AEROTHERMIQUE, REACTIVITE ET ENVIRONNEMENT (ICARE) – CNRS – UPR 3021 – 1C, Avenue de la recherche scientifique – 45071 Orléans cedex 2.