HAL
open science

# Ethanol et moteur Diesel : mécanismes de combustion et formation des polluants

Jean-Baptiste May-Carle

## To cite this version:

Jean-Baptiste May-Carle. Ethanol et moteur Diesel : mécanismes de combustion et formation des polluants. Autre. Université d'Orléans, 2012. Français. NNT : 2012ORLE2065 . tel-00843644

**HAL Id: tel-00843644**

**https://theses.hal.science/tel-00843644**

Submitted on 11 Jul 2013

**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.

# UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

***ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET TECHNOLOGIES***

Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement

**THÈSE** présentée par :


## Jean-Baptiste MAY-CARLE


pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université d'Orléans**

Discipline : Chimie-Physique

# Éthanol et moteur Diesel : mécanismes de combustion et formation des polluants

**THÈSE dirigée par :**

| | |
|---|---|
| **Philippe DAGAUT** | Directeur de recherche au CNRS Orléans |
| **Anne JAECKER-VOIROL** | Professeur associée (HDR) à l'IFPschool |

**RAPPORTEURS :**

| | |
|---|---|
| **Jean-François PAUWELS** | Professeur à l'Université de Lille 1 |
| **Murray THOMSON** | Professeur à l'Université de Toronto |

---

**JURY :**

| | |
|---|---|
| **Céline MORIN** | Professeur à l'Université de Valenciennes (Présidente) |
| **Philippe DAGAUT** | Directeur de recherche au CNRS Orléans |
| **Anne JAECKER-VOIROL** | Professeur associée à l'IFPschool |
| **Guillaume LEGROS** | Maitre de conférences à l'UPMC |
| **Jean-François PAUWELS** | Professeur à l'Université de Lille 1 |
| **Ludivine PIDOL** | Ingénieur de recherché à l'IFPEN |
| **Murray THOMSON** | Professeur à l'Université de Toronto |

# Avant-propos

Ce mémoire représente l'aboutissement de trois années de thèse, passées au sein de la division Technique d'Application Energétique (TAE) de l'IFP Energies Nouvelles dirigée par M. Henriot ainsi qu'à l'Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivités et Environnement (ICARE - CNRS Orléans) dirigé par M. Gökalp. Je les remercie de m'avoir permis de travailler dans d'excellentes conditions.

Il m'est difficile de trouver les mots pour remercier Philippe Dagaut, et Anne Jaecker-Voirol qui ont dirigé cette thèse. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma reconnaissance pour les précieux conseils, l'éclairage d'expert et les discussions fructueuses qu'ils me prodiguèrent et sans lesquels ce manuscrit n'aurait jamais vu le jour.

J'adresse toute ma gratitude à Ludivine Pidol pour m'avoir encadré tout au long de cette thèse. Je la remercie chaleureusement pour cette collaboration aussi enrichissante techniquement que sur le plan humain. Je n'oublie pas non plus l'apport indispensable d'André Nicolle et de Jörg Anderlohr, mes deux « hommes de l'ombre », qui m'ont si souvent sauvé des sables mouvants de la cinétique chimique.

Je souhaite exprimer toute ma reconnaissance à Jean-François Pauwels et Murray Thomson qui ont accepté de juger ce travail en tant que rapporteurs. Mes remerciements s'adressent également à Céline Morin pour avoir accepté de présider le jury auquel Guillaume Legros m'a fait l'honneur de participer.

Je remercie vivement Nicolas Jeuland, chef du département « Carburant Lubrifiant et Emissions » de l'IFPEN qui a suivi mes travaux avec intérêt et bienveillance malgré son importante charge de travail. Un grand merci également à tous les membres du département R104 avec qui j'ai eu le privilège de travailler : Laurie Starck, Ludovic Noël, Bertrand Lecointe, Roland Dauphin, Michel Pasquereau, Thierry Lacôme, Jean-Claude Fort et Arij Ben Amara. Ils m'ont chaleureusement intégré dans leur équipe et ont contribué au bon déroulement de cette thèse.

J'adresse toute ma gratitude aux membres de l'équipe Oxydation des Hydrocarbures (OH) du laboratoire ICARE avec lesquels j'ai eu la chance de travailler lors de mes (trop courts) passages au CNRS Orléans. Mention spéciale à Pascal Diévart, Casimir Togbé, Amir Mzé-Ahmed et Guillaume Dayma pour leur sympathie et leur disponibilité. Merci aussi à tous les membres du laboratoire que j'ai eu plaisir à côtoyer lors de mes campagnes expérimentales : Jérémy, Kodjo « Le Lion » Coudoro, Alexis, Julien, Brandon, Thomas, Jules et tous les autres. Grâce à eux, je garde de très bon souvenir de mes virées à Orléans.

Je n'aurais pu mener à bien ce travail de thèse sans l'expertise et le soutien des techniciens de l'IFPEN qui ont su faire preuve d'une grande patience pour accompagner mes premiers pas de motoriste. Merci à Ludovic-Charles Trainaud pour son assistance technique

lors des essais moteurs ainsi qu'à Pascal Hayrault pour son aide précieuse lors des analyses chimiques des polluants.

Ces trois années n'auraient certainement pas été les mêmes sans la convivialité et la bonne humeur que faisait régner la fine équipe du troisième étage de Claude Bonnier : Mathieu, cousin Hub', Gabrielle, O'Sulivan, Haïfa, Damien (sosie officiel de José *d'Hélène Et Les Garçons*), Betty Boop, Sabre, Stéphane, Anthony « Kéké Tuning » Robert, Carlo, Julien (alias le Goon), Kirsten, Nikola prince du Liban, Stavros le gréco-maçon, Yohan et tous ceux que j'oublie. Les bons moments passés en leur compagnie m'ont aidés à franchir les caps difficiles de la vie de jeune chercheur.

Enfin, je finirai par une tendre pensée pour mes parents et mes sœurs qui ont toujours cru en moi et m'ont apporté leur indéfectible soutien au cours de ces trois années. C'est à eux que je dédie cette thèse!

# Table des matières

**Nomenclature** ..... **9**

**Introduction** ..... **11**

**Chapitre I Contexte de l'étude** ..... **15**
**1. Biocarburant : les enjeux** ..... **17**
1.1 Épuisement des ressources fossiles ..... 17
1.2 Dérèglement climatique ..... 17
1.3 Une réglementation de plus en plus stricte ..... 18
**2. Les différentes filières de production des biocarburants** ..... **19**
2.1 Filière bioéthanol ..... 19
2.1.1 Production d'éthanol à partir des plantes sucrières ..... 20
2.1.2 Production d'éthanol à partir des plantes amylacées ..... 20
2.1.3 Limites à l'utilisation de l'éthanol carburant ..... 20
2.2 Filière des huiles végétales et leurs dérivés ..... 20
2.2.1 Production d'ester méthylique d'huile végétale ..... 21
2.2.2 Production d'huile végétale hydrotraitée ..... 21
2.2.3 Limites au développement de cette filière ..... 22
2.3 Biocarburants de deuxième génération ..... 22
2.3.1 Biomasse lignocellulosique ..... 22
2.3.2 Voie biochimique ..... 22
2.3.3 Voie thermochimique ..... 23
**3. Identification de mélanges carburants alternatifs pour moteur Diesel** ..... **24**
3.1 Intérêt de l'ajout d'éthanol dans le pool gazole ..... 24
3.2 Techniques de mélange gazole/éthanol ..... 25
3.3 Propriétés des mélanges gazole/éthanol ..... 26
3.3.1 Stabilité ..... 26
3.3.2 Viscosité ..... 30
3.3.3 Pouvoir lubrifiant ..... 31
3.3.4 Masse volumique ..... 32
3.3.5 Indice de cétane ..... 33
3.3.6 Pouvoir calorifique ..... 34
**4. Impact des mélange gazole/éthanol sur les performances du moteur** ..... **35**
4.1 Effet sur la combustion ..... 35
4.2 Consommation ..... 35
4.3 Rendement thermique ..... 36
4.4 Émissions polluantes ..... 37
4.4.1 Monoxyde de carbone ..... 37
4.4.2 Hydrocarbures imbrûlés ..... 37

4.4.3 Oxydes d'azote ..... 38
4.4.4 Particules ..... 39
4.6 Optimisation ..... 40
**5. Conclusion ..... 41**

**Chapitre II Choix d'un carburant modèle pour la combustion de biocarburants ..... 43**
**1. Introduction ..... 45**
**2. Méthodologie de construction d'un carburant modèle ..... 45**
2.1 Choix d'espèces modèles représentatives du GtL ..... 46
2.2 Choix d'espèces modèles représentatives de l'EMHC ..... 48
2.3 Mise au point du carburant modèle ..... 49
**3. État de l'art sur l'oxydation des hydrocarbures ..... 50**
3.1 Mécanisme d'oxydation à basse température ..... 50
3.2 Coefficient négatif de température ..... 51
3.3 Mécanisme d'oxydation a haute température ..... 52
**4. État de l'art sur l'oxydation des esters méthyliques ..... 53**
**5. État de l'art sur l'oxydation de l'éthanol ..... 59**
**6. Démarche globale de modélisation ..... 60**
**7. Conclusion ..... 61**

**Chapitre III Développement et validation du mécanisme cinétique ..... 63**
**1. Introduction ..... 65**
**2. Base C0-C4 ..... 65**
2.1 Choix du sous-mécanisme initial ..... 65
2.2 Modifications apportées ..... 65
**3. Sous-mécanisme d'oxydation du n-décane ..... 67**
3.1 Choix du sous-mécanisme initial ..... 67
3.2 Modifications apportées ..... 69
3.3 Confrontations modèle/expériences ..... 70
**4. Sous-mécanisme d'oxydation de l'iso-octane ..... 72**
4.1 Mécanisme initial ..... 72
4.2 Modifications apportées ..... 74
4.3 Confrontations modèle/expérience ..... 75
**5. Sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle ..... 77**
5.1 Mécanisme initial ..... 77
5.2 Modifications apportées ..... 78
5.3 Confrontations modèle/expérience ..... 78
**6. Sous-mécanisme d'oxydation de l'éthanol ..... 79**
6.1 Mécanisme initial ..... 79
6.2 Modifications apportées ..... 81
6.3 Confrontation modèle/expérience ..... 82
**7. Mise au point du mécanisme quaternaire ..... 84**
7.1 Elaboration du mécanisme global ..... 84

7.2 Validation ..... 85
**8. Conclusion ..... 86**

**Chapitre IV Étude expérimentale de l'oxydation de constituants de biocarburant en JSR ..... 89**
**1. Introduction ..... 91**
**2. Présentation du réacteur auto-agité par jet gazeux ..... 91**
2.1 Principe de fonctionnement ..... 91
2.2 Description du réacteur auto-agité ..... 91
2.3 Calcul des débits ..... 93
2.4 Analyse des échantillons ..... 94
2.4.1 Analyse FTIR ..... 94
2.4.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse ..... 94
2.4.3 Analyse par spectrométrie de masse ..... 96
2.5 Répétabilité et incertitude de mesure ..... 96
2.5.1 Répétabilité des essais ..... 96
2.5.2 Estimation de l'incertitude de mesure ..... 96
**3. Étude de l'oxydation de mélanges binaires ..... 97**
3.1 Protocole expérimental ..... 97
3.2 Résultats expérimentaux et validation du mécanisme ..... 97
**4. Étude de l'oxydation de mélanges ternaires ..... 102**
4.1 Protocole expérimental ..... 102
4.2 Résultats expérimentaux et validation du mécanisme ..... 102
4.2.1 Oxydation du mélange GtL90B10 ..... 103
4.2.2 Oxydation du mélange GtL40B60 ..... 107
4.3 Analyse de voies réactionnelles et de sensibilité ..... 111
**5. Étude de l'oxydation de mélanges quaternaires ..... 117**
5.1 Protocole expérimental ..... 117
5.2 Résultats expérimentaux et validation du mécanisme ..... 117
5.2.1 Oxydation du mélange GtL80B10E10 ..... 118
5.2.2 Oxydation du mélange GtL60B20E20 ..... 122
5.2.3 Oxydation du mélange GtL40B30E30 ..... 126
5.3 Impact de l'éthanol sur la réactivité du mélange ..... 126
**6. Conclusion ..... 131**

**Chapitre V Étude expérimentale de la combustion de biocarburants en moteur monocylindre Diesel ..... 133**
**1. Introduction ..... 135**
**2. Présentation des moyens d'essais ..... 135**
2.1 Caractéristiques du moteur utilisé ..... 135
2.2 Configuration du circuit EGR ..... 136
2.3 Méthodes de prélèvement et d'analyse ..... 137

2.3.1 Prélèvement et analyse des polluants réglementés ..... 137
2.3.2 Prélèvement et analyse des HC légers $C_1$-$C_9$ ..... 137
2.3.3 Prélèvement et analyse des aldéhydes et des cétones ..... 137
2.4 Répétabilité des essais et incertitude de mesure ..... 138
**3. Méthodologie ..... 138**
3.1 Matrice carburant ..... 138
3.2 Conditions expérimentales ..... 139
3.3 Présentation des résultats ..... 141
**4. Point de fonctionnement 1500 tr/min - 3 bar ..... 142**
4.1 Iso-réglages ..... 142
4.1.1 Variation AVI ..... 144
4.1.2 Variation EGR ..... 146
4.2 Optimisation ..... 147
4.2.1 Polluants réglementés ..... 149
4.2.2 Polluants non-réglementés ..... 152
**5. Point de fonctionnement 2500 tr/min - 6 bar ..... 153**
5.1 Iso-réglages ..... 153
5.1.1 Variation AVI ..... 155
5.1.2 Variation EGR ..... 156
5.2 Optimisation ..... 157
5.2.1 Polluants réglementés ..... 158
5.2.2 Polluants non réglementés ..... 161
**6. Point de fonctionnement 2000 tr/min - 11 bar ..... 162**
6.1 Iso-réglages ..... 162
6.1.1 Variation AVI ..... 163
6.1.2 Variation EGR ..... 164
6.2 Optimisation ..... 165
6.2.1 Polluants réglementés ..... 166
6.2.2 Polluants non réglementés ..... 169
**7. Conclusion ..... 170**

**Conclusion et perspectives ..... 173**

**Références Bibliographiques ..... 179**

**Annexes ..... 193**

# Nomenclature

## Abréviations

| | |
|---|---|
| AVI | AVance à l'Injection |
| BtL | Biomass to Liquid |
| CA10 | Angle vilebrequin pour lequel 10% du carburant a été brûlé |
| CA50 | Angle vilebrequin pour lequel 50% du carburant a été brûlé |
| CA90 | Angle vilebrequin pour lequel 90% du carburant a été brûlé |
| CF | Flamme à contre-courant (Counterflow Flame) |
| CFD | Simulation dynamique des écoulements (Computational Fluid Dynamics) |
| CFR | Cooperative Fuel Research Engine |
| CSI | Consommation Spécifique Indiquée |
| CtL | Coal to Liquid |
| EGR | Recirculation des gaz brûlés (Exaust Gaz recirculation) |
| EMAG | Ester Méthylique d'Acide Gras |
| EMHC | Ester Méthylique d'Huile de Colza |
| FFB | Brûleur à flamme plate (Flat Flame Burner) |
| FID | Détecteur à ionisation de flamme (Flame Ionisation Detector) |
| FTIR | Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (Fourier Transform Infrared) |
| FR | Réacteur à écoulement (Flow Reactor) |
| FSN | Niveau de fumée (Filter Smoke Number) |
| F-T | Fischer-Tropsch |
| GC | Chromatographie en phase gazeuse (Gas Chromatography) |
| GtL | Gas to Liquid |
| HAP | Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques |
| HC | Hydrocarbures imbrûlés |
| HPLC | Chromatographie en phase liquide (High Performance Liquid Chromatography) |
| HVO | Huiles végétales hydrotraitées (Hydrotraeted vegetable Oil) |
| JSR | Réacteur auto-agité (Jet Stirred Reactor) |
| NTC | Coefficient négatif de température (Negative Temperature Coefficient) |

| | |
|---|---|
| PCI | Pouvoir Calorifique Inférieur |
| PMI | Pression Moyenne Indiquée |
| ppm | Particules Par Million |
| PSR | Réacteur parfaitement agité (Perfectly Stirred Reactor) |
| RCM | Machine à compression rapide (Rapid Compression Machine) |
| SF | Bombe sphérique (Spherical Bomb) |
| ST | Tube à onde de choc (Shock Tube) |
| TCD | détecteur à conductibilité thermique (Thermal Conductivity Detector) |

## Symboles

| | |
|---|---|
| °V | Degré vilebrequin |
| $\Phi$ | Richesse [/] |
| $\tau$ | Temps de passage [s] |
| A | Facteur pré-exponentiel [variable selon l'ordre de la réaction] |
| Ea | Energie d'activation [$J.mol^{-1}$] |
| k | Constante de vitesse [variable selon l'ordre de la réaction] |
| M | Masse molaire [$g.mol^{-1}$] |
| n | Coefficient correctif de la loi d'Arrhenius [/] |
| P2 | Pression admission [bar] |
| Prail | Pression au sein du rail d'injection [bar] |
| R | Constante des gaz parfaits [$J.mol^{-1}.K^{-1}$] |
| T | Température [K] |
| T2 | Température admission [°C] |
| Ti | Durée injection [ms] |

# Introduction

Les fluctuations importantes du prix du baril de pétrole et la prise de conscience collective du caractère "non infini" des énergies fossiles ont fortement relancé l'intérêt général pour les biocarburants. Le remplacement d'une partie des carburants traditionnels par des produits issus de la biomasse répond à un triple enjeu : économique (indépendance énergétique), environnemental (effet de serre) et législatif (e.g., normes européennes).

En Europe, la part de marché très importante des véhicules Diesel engendre un déséquilibre de la balance pétrolière. Cela se traduit par des importations grandissantes de gazole et des exportations importantes d'essence. Bien qu'il soit généralement utilisé avec des carburants de type essence, l'incorporation de bioéthanol au sein du pool gazole peut contribuer à rééquilibrer les filières essence/gazole. De plus, l'utilisation de carburants enrichis en éthanol semble prometteuse pour réduire les émissions de particules à l'échappement des véhicules Diesel.

Cependant, la mise au point de ce type de biocarburant se heurte encore à certains verrous technologiques. En effet, l'éthanol et le gazole sont deux espèces assez peu miscibles, si bien que lorsque la température descend en dessous de 20°C le mélange a tendance à se séparer en deux phases distinctes. De plus, l'indice de cétane de l'éthanol est très faible ce qui peut perturber le bon fonctionnement du moteur. Une des solutions envisagées pour résoudre ces difficultés est l'ajout dans le biocarburant d'un co-solvant stabilisant le mélange. Le candidat généralement retenu pour jouer ce rôle est un mélange d'esters méthyliques d'acides gras (EMAG) communément appelé biodiesel. En effet, il possède des propriétés proches de celles du gazole et peut être produit en grande quantité à partir de la biomasse pour un coût raisonnable. En outre, la substitution du gazole par un carburant synthétique à fort indice de cétane de type Fischer-Tropsch (F-T) permet de compenser l'influence négative de l'éthanol sur l'auto-inflammation du carburant. L'utilisation de mélanges ternaires F-T/EMAG/éthanol semble donc prometteuse pour une utilisation en moteur Diesel.

Néanmoins, avant d'envisager une utilisation à grande échelle de ce type de carburant alternatif, il est primordial de comprendre les mécanismes cinétiques mis en jeu lors de la combustion de ces mélanges. En effet, l'optimisation des moteurs Diesel requiert une connaissance précise de la cinétique de combustion des carburants afin de gérer au mieux l'énergie produite et de limiter la formation des polluants.

**L'objectif majeur de ce travail de thèse est de permettre une meilleure compréhension de l'influence de la composition chimique du carburant sur la combustion Diesel. Cette étude s'appuie sur deux volets expérimentaux : une étude en réacteur auto-agité par jets gazeux et une campagne d'essais sur banc moteur.** Le réacteur auto-agité nous a permis d'étudier l'oxydation d'espèces modèles représentatives de mélanges GtL/EMAG/éthanol en fonction de la richesse, de la température et de la pression. Un mécanisme cinétique d'oxydation a été mis au point et validé par comparaison avec nos

résultats expérimentaux. L'étude sur banc moteur présente l'influence des carburants sur le calage de la combustion, le dégagement d'énergie, les émissions polluantes, le niveau de bruit et la consommation du moteur. Les prédictions du modèle cinétique ont ensuite été utilisées afin d'expliquer certaines tendances observées sur banc moteur.

Ce mémoire s'articule en cinq parties. Au **Chapitre I,** nous présenterons les enjeux de cette étude et la place de ce projet de recherche dans le contexte énergétique actuel. Cette partie décrit entre autre l'impact de l'utilisation de carburants enrichis en éthanol en moteur Diesel ainsi que les principaux verrous technologiques faisant obstacle à leur utilisation.

Le **Second Chapitre** présente la méthodologie mise en place au cours de ce travail de thèse pour définir un carburant modèle aux propriétés physico-chimiques similaires à celles des mélanges GtL/EMAG/éthanol. Cette étude nous a permis de sélectionner quatre espèces modèles servant de base à notre modélisation cinétique: le n-décane, l'iso-octane, l'octanoate de méthyle et l'éthanol. Ce chapitre présente également un état de l'art sur les mécanismes cinétiques de combustion des espèces utilisées dans notre carburant modèle.

Dans le **Troisième Chapitre**, les étapes successives de développement et de validation du mécanisme cinétique d'oxydation sont présentées. Les modèles cinétiques décrivant l'oxydation des quatre espèces modèles identifiées dans le chapitre précédent ont été sélectionnés et fusionnés afin d'obtenir le mécanisme quaternaire utilisé tout au long de cette étude. Cette partie présente également les améliorations majeures apportées au modèle ainsi que sa validation face à de nombreuses données expérimentales (délais d'auto-inflammation, profils d'espèces…) trouvées dans la littérature.

Le **Quatrième Chapitre** présente les résultats expérimentaux obtenus lors de l'oxydation à haute pression de mélanges d'espèces modèles (n-décane, iso-octane, octanoate de méthyle, éthanol) représentatives des mélanges GtL, GtL/EMAG et GtL/EMAG/éthanol en réacteur auto-agité. Le modèle cinétique développé au chapitre précédent a été utilisé pour simuler nos résultats expérimentaux et déterminer les voies de dégradation majoritaire des quatre réactifs constitutifs du mélange.

Enfin, le **Cinquième Chapitre** présente les résultats expérimentaux obtenus lors de notre campagne d'essais sur banc moteur monocylindre Diesel à l'IFPEN. Cette phase d'essais, incluant une analyse approfondie des émissions de polluants non réglementés, porte sur quatre carburants choisis parmi ceux dont l'oxydation à déjà été étudiée en réacteur auto-agité dans le chapitre précédent afin de mieux comprendre le rôle de la chimie du carburant sur la combustion en moteur Diesel. Des comparaisons entre les différents carburants ont été effectuées de manière à apporter des éléments de compréhension notamment sur l'influence des propriétés carburant sur la combustion Diesel.

# Chapitre I
# Contexte de l'étude

# 1. Biocarburant : les enjeux

## 1.1 Épuisement des ressources fossiles

La plupart des scénarii mis au point par les économistes statue sur une croissance régulière de la demande énergétique planétaire pour les vingt prochaines années. Dans ce bilan, les énergies nucléaire et renouvelables (éolien, hydraulique, solaire...), bien qu'en pleine expansion, resteront marginales face aux énergies fossiles. La demande en pétrole devrait donc encore progresser de plus de 20 % d'ici 2030 [1]. Dans le même temps, l'homme prend de plus en plus conscience que les ressources fossiles ne sont pas inépuisables. Ce paradoxe entre la forte dépendance pétrolière du secteur énergétique et les réserves déclinantes en hydrocarbures peut aboutir à une situation internationale extrêmement tendue [2].

Les biocarburants ont donc un rôle important à jouer puisqu'ils peuvent permettre de desserrer la contrainte pétrolière sur le domaine du transport. En effet, contrairement aux ressources fossiles qui sont en cours d'épuisement, les biocarburants sont produits à partir de la biomasse (ensemble des matières organiques animales ou végétales) et sont donc une source d'énergie renouvelable. De plus, la biomasse est mondialement répandue à l'inverse du pétrole qui est l'apanage de quelques pays détenteurs de l'ensemble des ressources. Le développement des filières de production de biocarburants peut participer à la réduction de la facture pétrolière de nombreux pays, favorisant ainsi leur indépendance énergétique [3].

## 1.2 Dérèglement climatique

Les gaz atmosphériques ($CO_2$, $H_2O$, $CH_4$) absorbent la majeure partie du rayonnement terrestre et engendrent une augmentation de la température terrestre. Ce phénomène naturel est connu sous le nom d'"effet de serre" et permet le maintien d'une température terrestre modérée. Cependant, depuis la révolution industrielle, l'augmentation rapide de l'activité humaine a eu pour conséquence le rejet d'une quantité importante de dioxyde de carbone ($CO_2$) dans l'atmosphère. Cet accroissement de la concentration en $CO_2$ atmosphérique, connu sous le nom d'"effet de serre additionnel", est considéré comme l'acteur principal de l'élévation récente de la température terrestre moyenne [4]. Les conséquences prévus de ce réchauffement climatique étant préoccupantes (élévation du niveau de la mer, extinction accru d'espèces animales, diminution des ressources en eau...), de nombreux pays ont décidé de réduire leurs émissions de gaz à effet de serre [5]. En particulier, l'Union Européenne s'est fixé pour objectif une diminution de 20% de ses gaz à effet de serre d'ici 2020 [6].

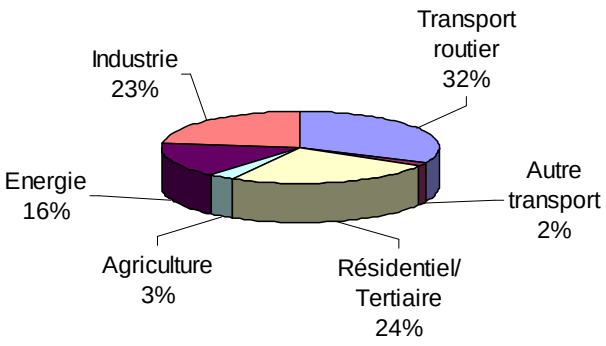



Figure I-1 : Emissions atmosphérique de $CO_2$ par secteur en France en 2009, d'après [7]

En France, le transport routier est responsable de plus de 30% des émissions de dioxyde de carbone atmosphérique (cf. figure I-1) [7]. Dans ce contexte, l'utilisation de biocarburants peut permettre de limiter l'impact des transports routiers sur les émissions de $CO_2$. En effet, les végétaux constituant la biomasse se développent grâce au phénomène de photosynthèse. Ils absorbent le dioxyde de carbone environnant pour le transformer en matière organique en exploitant l'énergie solaire. In fine, le $CO_2$ produit lors de l'oxydation des biocarburants est une recirculation du $CO_2$ servant à la croissance des végétaux : il ne participe donc pas à l'effet de serre additionnel. On parle de bilan "du puits à la roue" souvent favorable aux biocarburants puisque sur l'ensemble de leurs cycles de vie, ils peuvent permettre une réduction des émissions de gaz à effet de serre par rapport aux énergies fossiles [2].

## 1.3 Une réglementation de plus en plus stricte

Le transport routier est également mis en cause en ce qui concerne les émissions polluantes. Les polluants réglementés rejetés par les automobiles sont le monoxyde de carbone (CO), les hydrocarbures imbrûlés (HC), les oxydes d'azotes (NOx) et les particules. Ces composés ont un fort impact sur la qualité de l'air et la santé humaine. Ils font donc l'objet de réglementations de plus en plus sévères (cf. Figure I-2). Les constructeurs automobiles se retrouvent donc devant un double défi : d'une part limiter les émissions de $CO_2$ et d'autre part réduire les émissions de composés polluants. Une des solutions envisageables à court terme pour relever ce défi passe également par l'utilisation de biocarburants. En effet, la forte teneur en oxygène de certains biocarburants (éthanol, biodiesel) ou leur composition chimique simple (F-T, HVO) peuvent favoriser la combustion et permettre une réduction non négligeable de certaines émissions polluantes, notamment les particules.

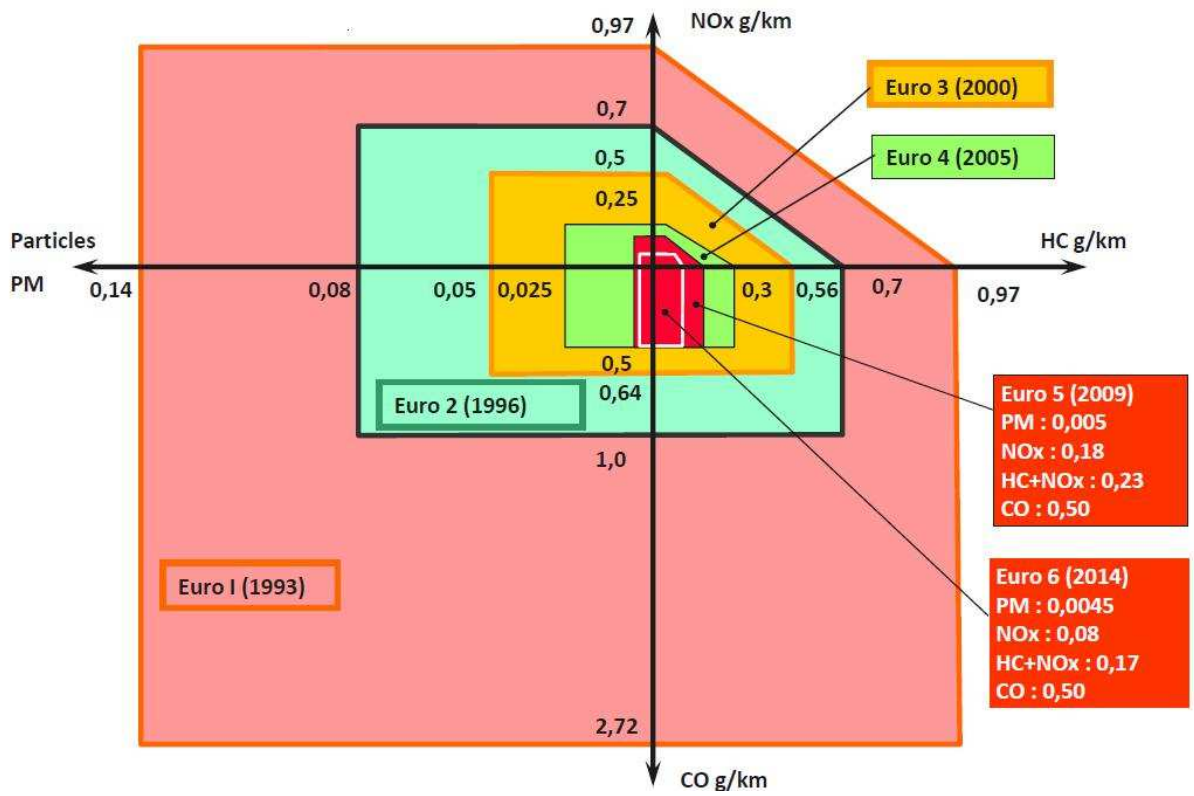



Figure I-2 : Evolution des normes européennes antipollution pour véhicule Diesel [8]

# 2. Les différentes filières de production des biocarburants

Les deux filières de production de biocarburants les plus développées industriellement à l'heure actuelle conduisent à la production d'éthanol et d'esters méthyliques d'acide gras (EMAG) à partir de produits agricoles. Néanmoins, ces filières dites de première génération souffrent de limitations en termes d'approvisionnement en matières premières. En effet, la disponibilité en surfaces cultivées est limitée et peut entraîner une concurrence entre la production de biocarburants et les usages alimentaires. C'est pourquoi de nombreux travaux de recherche s'intéressent à la diversification des sources d'approvisionnement en matières premières d'origine végétale.

## 2.1 Filière bioéthanol

L'éthanol est de loin le biocarburant le plus utilisé dans le monde à l'heure actuelle [9]. Certaines de ses propriétés (indice d'octane élevé, densité proche de celle de l'essence, bonne miscibilité avec l'essence...) en font le biocarburant privilégié des moteurs à allumage commandé [9,10]. Les matières premières pour la fabrication de bioéthanol se répartissent en deux grandes catégories :

- les plantes sucrières comme la canne à sucre ou la betterave. Ces végétaux renferment des sucres directement fermentescibles en éthanol. En France, la

principale plante sucrière utilisée pour produire des biocarburants est la betterave (9 millions d'hectolitres en 2010).

- les plantes amylacées comme les céréales ou les tubercules. Dans ces végétaux, le sucre est présent sous forme de polymère : l'amidon. Celui-ci doit être hydrolysé en monomères sucrés avant d'être transformé en éthanol. En France, la plante amylacée majoritairement utilisée pour produire du bioéthanol est le blé. Cette production reste cependant marginale en France par rapport à la filière betterave.

### 2.1.1 Production d'éthanol à partir des plantes sucrières

Les plantes sont tout d'abord lavées puis pressées pour en extraire le jus sucré qui est ensuite introduit dans des fermenteurs où se déroule la transformation biologique des sucres en éthanol sous l'action de microorganismes comme le *saccharomyce cerevisiae.* Les "vins" obtenus en fin de fermentation renferment 10% d'alcool dans de l'eau. Il faut donc séparer l'éthanol de la phase aqueuse par distillation et déshydratation sur tamis moléculaire [3,9].

### 2.1.2 Production d'éthanol à partir des plantes amylacées

Les plantes sont lavées et broyées pour extraire l'amidon. Malheureusement, ce polymère n'est pas directement fermentescible en éthanol. Il faut donc l'hydrolyser à l'aide d'enzymes industrielles pour produire du glucose. Ce sucre est alors transformé en éthanol sous l'action de levures industrielles. En sortie de fermenteur, les vins sont distillés pour récupérer l'éthanol [3,9].

### 2.1.3 Limites à l'utilisation de l'éthanol carburant

Le principal obstacle à l'utilisation du bioéthanol comme carburant automobile est la compétition avec les usages alimentaires. En effet, l'un des objectifs de la dernière directive du parlement Européen est d'incorporer au minimum 10% vol. de biocarburants dans la consommation totale de carburant d'ici 2020 [6]. Si cet objectif paraît réalisable en terme de surfaces agricoles mobilisables, cela entraînera fatalement une concurrence avec la filière alimentaire. Afin d'éviter les tensions concernant l'utilisation des récoltes, il est nécessaire de développer au plus vite de nouveaux procédés permettant de valoriser la biomasse à usage non alimentaire. L'éthanol souffre également d'un coût de production supérieur à celui de l'essence. A l'heure actuelle, ce désavantage économique est compensé par des allègements fiscaux accordés par l'état [2].

## 2.2 Filière des huiles végétales et leurs dérivés

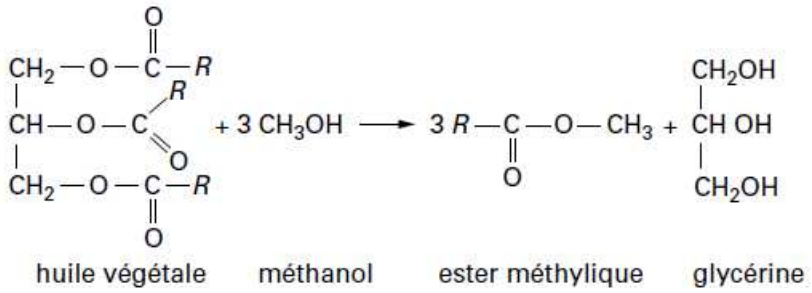
Le deuxième type de biocarburant développé industriellement à l'heure actuelle est l'EMAG. Ce composé est utilisé dans les moteurs à allumage par compression en substitution d'une partie du gazole traditionnel. Chimiquement parlant, l'EMAG est un mélange d'esters

méthyliques à longues chaînes qui possède des propriétés proches de celles du gazole (indice de cétane, viscosité...) [10].

Bien que l'EMAG soit majoritairement produit à partir d'huiles végétales provenant de plantes oléagineuses (colza, palme, tournesol, soja...), rien n'empêche l'utilisation de matières grasses moins conventionnelles : huiles usagées [11] et graisses animales [12]. En Europe, la majorité des huiles végétales sont obtenues par simple pressage des graines de colza ou de tournesol. Ces huiles ne sont pas utilisées telles quelles en France car leurs propriétés ne permettent pas un bon fonctionnement des moteurs Diesel (indice de cétane trop faible, de l'ordre de 40, et viscosité trop élevée pour permettre une combustion de bonne qualité). Elles sont donc transformées en ester méthylique (ou éthylique) d'huile végétale par un procédé de transestérification ou bien hydrotraitées en mélange paraffinique.

### 2.2.1 Production d'ester méthylique d'huile végétale

La production d'EMAG est un procédé relativement simple de transestérification de l'huile végétale par réaction avec du méthanol pour former de la glycérine et des esters méthyliques (cf. réaction I-1). Cette réaction à lieu à température modérée en présence d'un catalyseur homogène ou hétérogène [13]. Les esters méthyliques sont séparés de la glycérine par décantation statique. Le rendement massique de ce procédé est d'environ 99 %. Il est important de noter que le méthanol utilisé au cours de ce procédé est généralement d'origine fossile. L'EMAG n'est donc pas à proprement parler une source d'énergie renouvelable à 100%. La proportion de molécules d'origine biologique reste cependant très élevé (95%).




(R I-1)

### 2.2.2 Production d'huile végétale hydrotraitée

Un procédé récent permet d'hydrotraiter les triglycérides contenus dans les huiles végétales afin de produire un mélange d'alcanes, du propane, de l'eau et du $CO_2$. Le mélange de paraffines ainsi obtenu, aussi appelé huile végétale hydrotraitée ou HVO (Hydrotreated Vegetable Oil), possède un indice de cétane très élevé et semble donc prometteur pour un usage en moteur Diesel ou turbine. Cependant, ce procédé est plus complexe que celui de transestérification et nécessite d'importantes quantités d'hydrogène [3].

### 2.2.3 Limites au développement de cette filière

Il existe deux limites principales au développement de cette filière. Tout d'abord, les surfaces agricoles disponibles pour la culture de plantes oléagineuses en France sont très insuffisantes pour atteindre l'objectif de 10% d'énergie renouvelable dans les transports en 2020 fixé par la dernière directive Européenne [6]. Cette situation se traduit à l'heure actuelle par une importation massive d'huile de palme et de soja. Dans ce contexte, il devient urgent de développer de nouvelles filières, impliquant d'autres ressources végétales. De plus, tout comme le bioéthanol, l'EMAG affiche un coût de production supérieur à celui des carburants d'origine pétrolière. Pour être compétitif, il doit donc être partiellement détaxé.

## 2.3 Biocarburants de deuxième génération

Ces dernières années, un effort de recherche très important a été porté sur l'exploitation de nouvelles ressources pour la production de biocarburants afin d'élargir le spectre des ressources utilisables. L'intérêt de ces nouvelles filières, dites de seconde génération, est de valoriser une grande partie de la biomasse jusqu'alors inexploitée : les résidus agricoles et forestiers par exemple. Ces sources d'énergie renouvelable sont facilement mobilisables et ne sont pas en compétition directe avec les usages alimentaires. De plus, contrairement aux procédés de première génération où seulement une partie de la plante est exploitée (grain, tubercule...), la totalité de la biomasse est potentiellement convertible en carburant ce qui laisse espérer des rendements nettement supérieurs.

### 2.3.1 Biomasse lignocellulosique

La biomasse lignocellulosique provient principalement des résidus forestiers issus du déboisement et de la transformation du bois (feuilles, écorces, sciures...), des résidus agricoles (paille, fumier, lisier...) et des déchets organiques ménagers (papier, carton, déchets alimentaires...). Afin de compléter les ressources, une production dédiée à la biomasse est même envisageable avec des cultures à fort rendement comme les plantes annuelles (triticale...) ou les cultures pérennes à rotation rapide (peuplier, saule...). La biomasse lignocellulosique est composée de cellulose, d'hémicellulose et de lignine. Ces trois polymères de la paroi cellulaire végétale, fortement associés entre eux, forment une matrice rigide difficilement déstructurable. La biomasse lignocellulosique représente donc une ressource abondante largement sous-exploitée actuellement. Elle détient un fort potentiel pour la fabrication d'éthanol selon la voie biochimique et de BtL (Biomass to Liquid) selon la voie thermochimique [3].

### 2.3.2 Voie biochimique

Tout d'abord, la biomasse lignocellulosique est prétraitée. C'est à dire qu'elle subit un ensemble de procédés physico-chimiques visant à la déstructurer pour rendre accessible les

constituants hydrolysables (cellulose et hémicellulose) qui la composent. Les molécules de cellulose sont ensuite transformées en glucose par hydrolyse enzymatique. Les sucres obtenus par l'hydrolyse de la biomasse lignocellulosique doivent ensuite être transformés en éthanol dans les fermenteurs. La lignine quant à elle ne peut être fermentée en éthanol. En revanche, elle peut fournir l'énergie nécessaire au bon fonctionnement du procédé. Une fois l'éthanol obtenu, il est nécessaire de le séparer du reste des constituants (moût de fermentation) à l'aide d'une distillation à pression atmosphérique et d'une déshydratation sur tamis moléculaire qui permet d'obtenir de l'éthanol anhydre (99,8% vol.) [2,3,14].

## 2.3.3 Voie thermochimique

Deux procédés de conversion thermochimique de la biomasse, porteurs de réels enjeux pour la production de bioénergie, sont actuellement en cours de développement : la pyrolyse et la gazéification.

### 2.3.3.1 Pyrolyse :

En l'absence d'oxygène et sous l'action de la chaleur, les constituants de la biomasse sont convertis en trois phases valorisables : solide (charbon), liquide (huile de pyrolyse) et gazeuse (principalement CO, $H_2$, $CO_2$ et $CH_4$). Le contrôle des paramètres opératoires (température, vitesse de chauffage, pression et temps de séjour) permet d'orienter la transformation de la biomasse vers l'une de ces trois phases et de maximiser les rendements [3]. Une utilisation directe des huiles pyrolytiques dans les moteurs semble difficile. En effet, elles sont riches en oxygène, très denses, fortement acides et peu miscibles avec les hydrocarbures. En revanche, l'une des voies privilégiées à l'heure actuelle pour produire des biocarburants à partir de la biomasse lignocellulosique est l'utilisation de ces bio-huiles pour alimenter le processus de gazéification décrit dans le paragraphe suivant.

### 2.3.3.2 Gazéification :

La gazéification est un procédé combinant des processus thermiques et chimiques à température élevée (T>800°C) dans des réacteurs à lits fixes à contre courant ou à co-courant. Après une étape de prétraitement (séchage, broyage...), la biomasse est pyrolysée. Les produits de cette pyrolyse sont alors portés à haute température en présence de vapeur d'eau pour favoriser la réaction de water gas shift (cf. réaction I-2). En sortie de réacteur, on obtient un mélange gazeux riche en CO et en $H_2$, appelé gaz de synthèse.

$$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2 \qquad \text{(R I-2)}$$

Le gaz de synthèse peut être employé tel quel pour fournir de la chaleur ou de l'électricité, ou bien il peut être utilisé pour la synthèse de biocarburants (méthanol, diméthyle éther ou BtL). La voie la plus intéressante semble être la production de BtL (Biomass to Liquid) par un procédé de type Fisher-Tropsch. Cette synthèse se fait à des pressions élevées

(10 à 40 bar) et à température modérée (200 à 350°C) en présence d'un catalyseur (généralement du cobalt ou du fer) selon la réaction I-3. Le rendement massique de ce type de procédé est de l'ordre de 65 %.

$$\left(n+\frac{m}{2}\right)H_2 + n\,CO \rightarrow C_nH_m + n\,H_2O \qquad \text{(R I-3)}$$

Le BtL est un mélange de n-paraffines et d'iso-paraffines très pur possédant un indice de cétane de l'ordre de 70. Son excellent indice de cétane ainsi que son très faible taux d'aromatiques peuvent permettre d'optimiser la combustion dans le moteur Diesel et ainsi de réduire les émissions polluantes. La figure I-3 schématise les divers procédés permettant d'obtenir des carburants diversifiés (qu'ils soient d'origine fossile ou biologique).

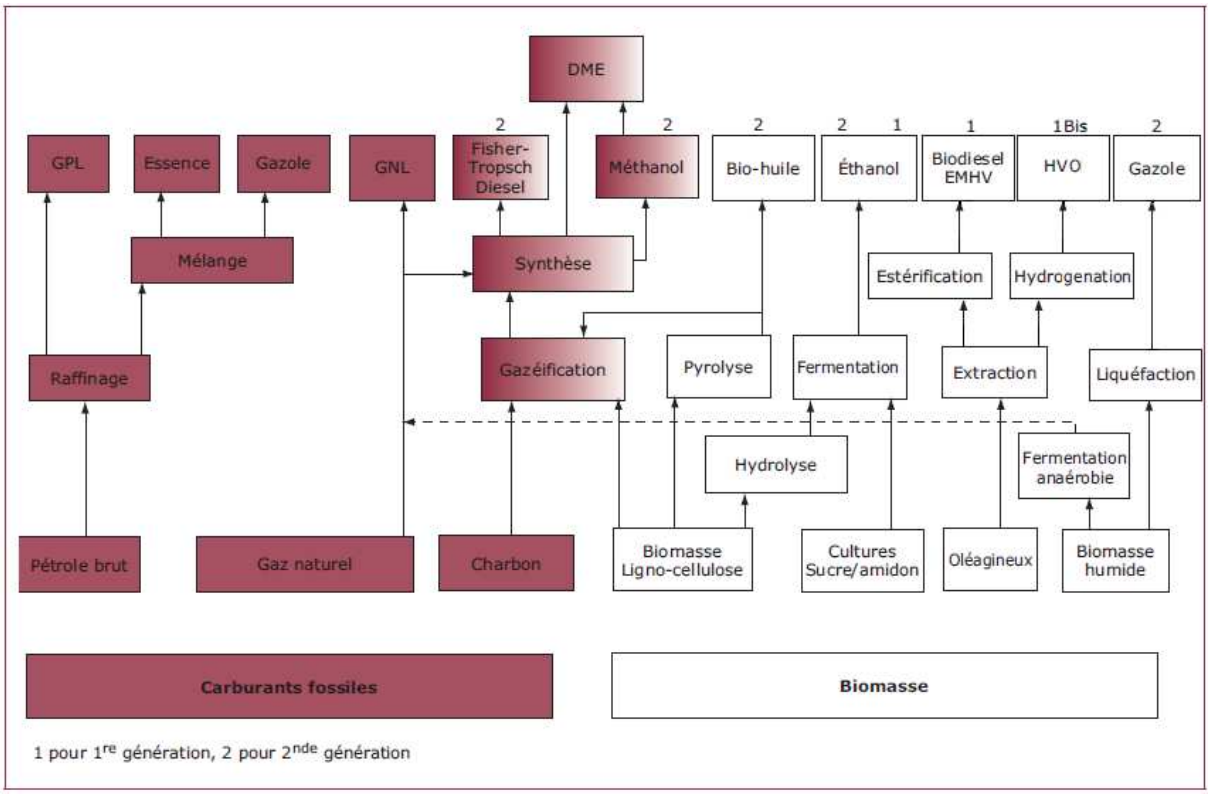



Figure I-3 : Large gamme de carburants alternatifs et pétroliers, [14]

# 3. Identification de mélanges carburants alternatifs pour moteur Diesel

## 3.1 Intérêt de l'ajout d'éthanol dans le pool gazole

Habituellement, le gazole est mélangé avec l'EMAG qui possède des propriétés très proches des siennes (viscosité, indice de cétane…) [15]. Cependant, depuis quelques années, plusieurs pays européens étudient la possibilité d'utiliser l'éthanol comme composant des carburants de type gazole. En effet, l'augmentation de la demande pour les véhicules Diesel

dans les pays de l'union européenne entraîne un surplus d'essence et un manque de gazole (cf. figure I-4). Dans le cas de la France, cela se traduit par des importations de plus en plus importantes de gazole et des exportations d'essence de plus en plus difficiles à mesure que la consommation américaine diminue. L'utilisation d'éthanol dans les véhicules à allumage commandé ne fait qu'accentuer ce déséquilibre. Il semble donc plus profitable d'utiliser une partie du bioéthanol produit en France pour réduire notre besoin en gazole plutôt que d'accroître encore notre excédent d'essence.

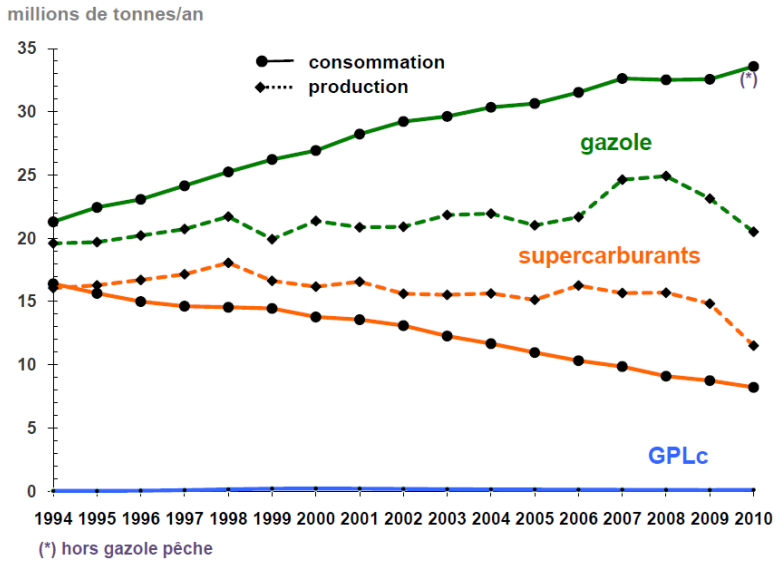



Figure I-4 : Evolution de la production et de la consommation de carburant en France [16]

## 3.2 Techniques de mélange gazole/éthanol

L'éthanol a des propriétés très différentes de celles du gazole ce qui peut entraîner un mauvais fonctionnement du moteur Diesel. Plusieurs techniques ont été développées afin de permettre l'utilisation de l'éthanol dans les moteurs à allumage par compression. On peut différencier quatre méthodes principales :

- **Éthanol pur:** La possibilité d'utiliser de l'éthanol pur comme carburant dans les moteurs à allumage par compression est étudiée par certains constructeurs (Scania...). Cette méthode a l'avantage d'éviter les problèmes liés à la stabilité des mélanges gazole/éthanol mais elle nécessite de lourdes modifications du moteur et entraîne une surconsommation importante [17-19].

- **Fumigation d'éthanol dans la chambre d'injection du carburant.** L'éthanol sous forme de vapeur est introduit dans le collecteur d'admission et interagit avec le gazole. Certaines études arrivent à la conclusion que les rendements obtenus sont meilleurs qu'avec un simple mélange. Néanmoins, cette méthode nécessite des modifications du moteur [20,21].

- **Système à double injection.** L'éthanol et le gazole sont stockés dans deux réservoirs différents et mélangés lors de l'injection. Encore une fois, cette technique nécessite des modifications importantes du moteur (ajout d'un deuxième système d'injection…) [22].
- **Mélanges d'éthanol et de gazole à l'aide d'un co-solvant.** L'union des deux composés est favorisée par l'ajout d'une espèce chimique qui va jouer le rôle de co-solvant. Ce composé joue favorise le mélange des molécules initialement non miscibles. Le mélange sera alors assez stable pour être utilisé comme carburant [23-25].

Ce travail de thèse se concentre exclusivement sur la quatrième méthode qui semble la plus viable économiquement. En effet, les mélanges gazole/éthanol peuvent être utilisés sans entrainer de modifications importantes des moteurs diesels actuels à condition d'utiliser une formulation adaptée. Les paragraphes suivants ne traiteront donc que des mélanges éthanol/gazole.

## 3.3 Propriétés des mélanges gazole/éthanol

Un carburant de type gazole doit répondre à certains critères essentiels pour permettre un bon fonctionnement des moteurs Diesel. L'addition d'éthanol dans le gazole affecte certaines de ses propriétés clés. Il est donc essentiel de quantifier l'impact de l'ajout d'éthanol sur les caractéristiques du gazole afin de s'assurer de la viabilité des mélanges gazole/éthanol en tant que carburant. Le Tableau I-1 recense certaines propriétés physico-chimiques importantes de quelques carburants.

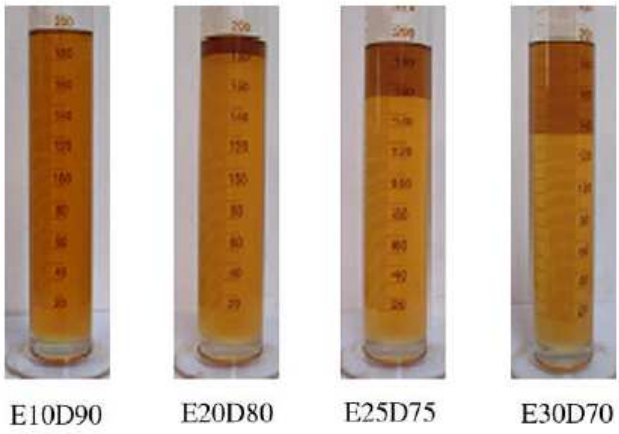
Tableau I-1 : Propriétés physico-chimiques importantes de 4 carburants

| | Gazole (EN 590) | F-T | EMAG (EN 14214) | Éthanol |
|---|---|---|---|---|
| Indice de cétane | 51 | 51-70 | 51 | 5-15 |
| Masse volumique à 15°C ($kg.m^{-3}$) | 820-845 | 770-800 | 860-900 | 789 |
| Viscosité à 40°C (cSt) | 2-4,5 | 1,2-4 | 3,5-5 | 0,017 |
| Point de trouble (°C) | (-10)-(-34) | / | / | / |
| PCI ($MJ.kg^{-1}$) | 43 | 44 | 37 | 29 |
| Point éclair (°C) | 55 | 55 | 120 | 13 |

### 3.3.1 Stabilité

Le principal obstacle pour l'utilisation de l'éthanol dans les moteurs Diesel est sa faible solubilité dans le gazole. En effet, l'éthanol est une molécule polaire qui se mélange assez mal avec les constituants majoritairement apolaires du gazole. La faible miscibilité des deux composés entraîne donc la formation de deux phases distinctes au sein du mélange. La phase supérieure contient l'éthanol tandis que la phase inférieure contient les éléments plus

denses constituant le gazole. La Figure I-5 représente quatre mélanges gazole/éthanol après quelques jours de décantation. Le mélange E10D90, contenant 10% vol. d'éthanol, reste stable 72 heures avant que les deux phases n'apparaissent. Le mélange E20D80 (contenant 20% vol. d'éthanol) se sépare au bout de 24h. Quant aux mélanges E25D75 et E30D70, contenant respectivement 25 et 30% vol. d'éthanol, ils restent stables pendant 2 heures pour le premier et 5 minutes pour le second à température ambiante [26].




E10D90: 90% gazole +10% éthanol(vol.)
E20D80: 80% gazole +20% éthanol(vol.)
E25D75: 75% gazole +25% éthanol(vol.)
E30D70: 70% gazole +30% éthanol(vol.)

Figure I-5 : Stratifications de plusieurs mélanges gazole/éthanol, [26]

La solubilité de l'éthanol dans le gazole dépend majoritairement de trois facteurs : la quantité d'éthanol, la température et la teneur en eau du mélange. La présence d'eau dans le mélange favorise la séparation des deux composés. En effet, la haute polarité de la molécule d'eau intensifie le caractère polaire de la fonction alcool. Les éléments constitutifs du gazole étant apolaires, ils peuvent difficilement se mélanger avec l'éthanol en présence d'eau. Au final, plus la teneur en eau du mélange augmente, plus la séparation des deux phases aura lieu pour une quantité d'éthanol ou une température faible. L'utilisation d'éthanol anhydre est donc indispensable pour assurer l'homogénéité du carburant [27]. La température joue également un rôle crucial dans la stabilité des mélanges gazole/éthanol. A température ambiante, le gazole et l'éthanol anhydre semblent miscibles. Néanmoins, en dessous de 20°C les deux composés se séparent, ce qui pose un problème majeur dans la plupart des pays européens. Plus la température baisse, plus les mélanges ont tendance à se séparer pour une faible teneur en éthanol ou en eau [23-25].

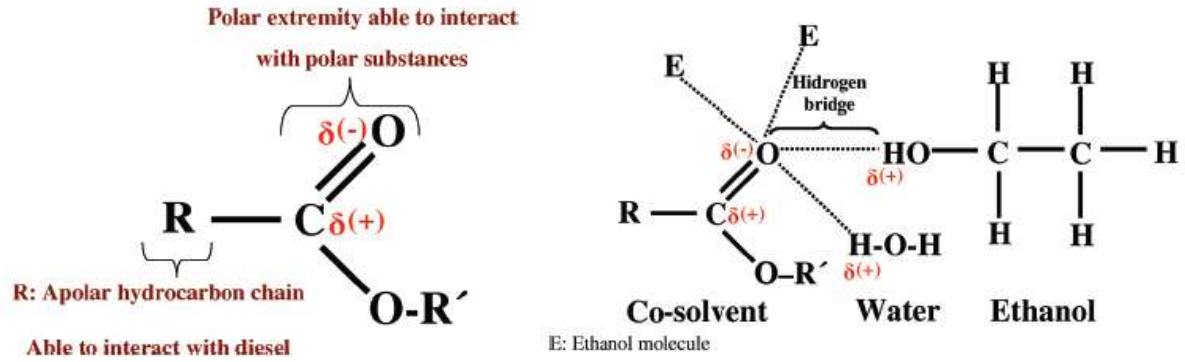



Figure I-6 : Structure d'un co-solvant et interaction avec les molécules polaires, [28]

Afin de stabiliser efficacement les mélanges gazole/éthanol, il est possible d'utiliser un co-solvant qui va agir comme un agent de liaison entre les différentes espèces. Les molécules servant de co-solvant sont généralement amphiphiles [28]. C'est-à-dire qu'elles possèdent un groupement polaire pouvant interagir avec l'éthanol et l'eau par des liaisons hydrogènes et une chaîne carbonée apolaire capable d'interagir avec les constituants du gazole grâce à des liaisons de Van der Waals (cf. Figure I-6). L'ajout de co-solvant peut se faire par mélange direct avec le carburant ce qui facilite l'étape de production. Hansen et al. [23,24] considèrent qu'il faut ajouter approximativement 2% de surfactant par tranche de 5% d'éthanol dans le carburant pour obtenir un mélange stable. Fernando et al. [29], ont étudié la miscibilité de l'éthanol dans les mélanges gazole/EMAG et ont observé une stabilisation du mélange due au caractère amphiphile de l'EMAG. En effet, les esters méthyliques constituants l'EMAG possèdent un groupement polaire (fonction ester) qui va interagir avec l'éthanol, et une chaîne carbonée apolaire qui va se mettre en contact avec les groupements apolaires du gazole. Ce phénomène va entraîner la formation de micelles : agrégats sphéroïdales ayant une tête polaire (contenant l'éthanol) et plusieurs queues apolaires dirigées vers l'extérieur et interagissant avec le gazole. Il va donc y avoir une suspension de petites gouttelettes d'éthanol au sein du gazole. Ces micelles vont ensuite se lier les uns aux autres par l'intermédiaire de forces de Van Der Waals pour former des complexes moléculaires stables et assurer l'homogénéité du mélange ternaire (cf. Figure I-7).

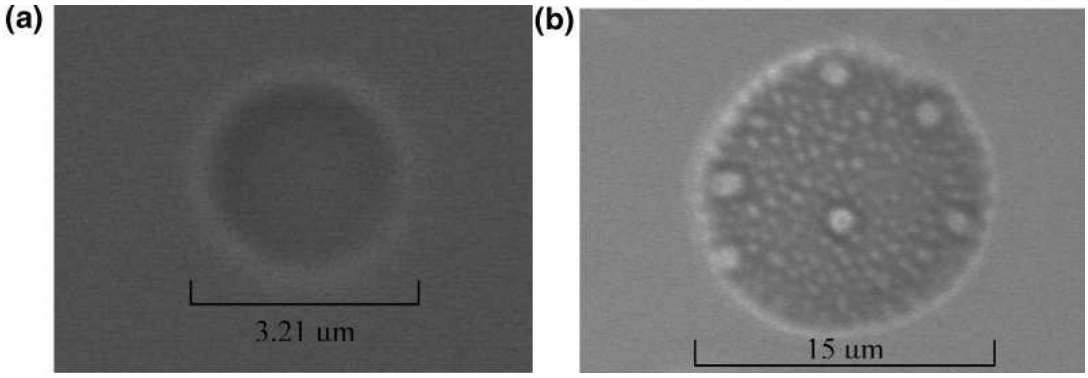



*Figure I-7 : (a) micelle gazole/EMAG/ethanol (b) complexe moléculaire formé par coalescence [29]*

De nombreux émulsifiants et co-solvants applicables aux mélanges éthanol/gazole ont fait l'objet d'études. Dans la littérature, les co-solvants les plus cités sont : l'isopropanol [30], le butanol [26], l'octanol [31-33], le dodecanol [34-36], le tétrahydrofurane [37], l'acide oléique [38] et l'acétate d'éthyle [39,40] et l'EMAG [41-51]. Dans un article récent, Satgé de Caro et al. [52] ont mis au point un mélange de deux composés organiques polaires (1-octylamino-3-octyloxy-2-propanol et N-(2-nitrato-3-octyloxy propyl), N-octyl nitramine) permettant une stabilisation efficace d'un mélange gazole/éthanol tout en augmentant son indice de cétane. Il existe également des additifs commerciaux, à la formule chimique brevetée, qui peuvent être fournis par des industries chimiques [25,28,53-63]. Néanmoins, parmi tous les additifs utilisables, l'EMAG tient une place prépondérante. Ceci s'explique pour plusieurs raisons. Tout d'abord, les propriétés chimiques des esters méthyliques sont assez proches de celles du gazole, ce qui permet l'introduction de ce composé en quantité importante dans le mélange sans bouleverser les caractéristiques du carburant. En outre, l'addition d'ester améliore la viscosité et le pouvoir lubrifiant du mélange. Enfin, les esters méthyliques sont produits à partir de sources d'énergies renouvelables (huiles végétales, graisses animales...) et permettent donc l'obtention d'un carburant respectueux de l'environnement à un prix raisonnable. Pour toutes ces raisons, les mélanges ternaires gazole/EMAG/éthanol ont émergé comme carburant alternatif pour moteur Diesel [41-50,64].

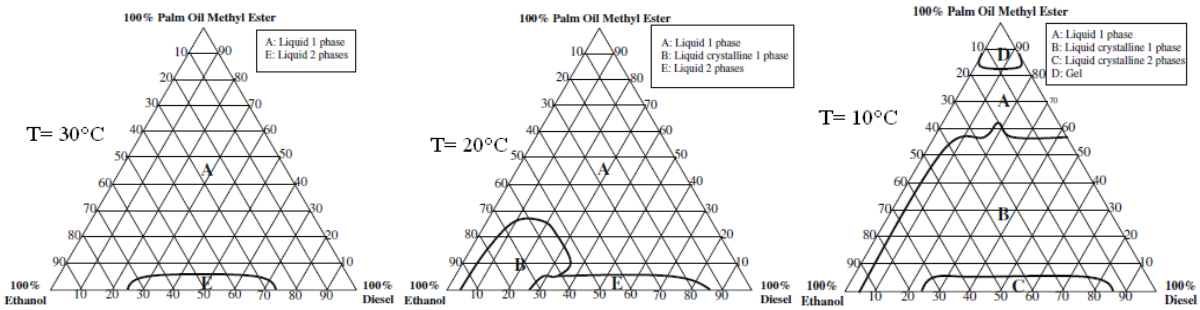



Figure I-8 : Diagrammes de phases de mélanges gazole/EMAG/éthanol à 3 températures, [65]

Certains auteurs ont même proposé des diagrammes de phase détaillés pour ces mélanges ternaires [29,65-67]. La Figure I-8 donne un exemple de comportement d'un mélange comprenant du gazole, de l'éthanol pur à 99,5% et des esters méthyliques d'huile de palme après 7 jours de conservation à 30, 20 et 10°C respectivement. A 30°C, on voit bien que tous les mélanges sont stables, sauf ceux contenant moins de 5% vol. d'EMAG et plus de 25% vol. d'éthanol. A 20°C, la majorité des mélanges sont toujours stables. On remarque cependant que la zone de démixtion est légèrement plus étendue : en l'absence d'EMAG, on observe la formation de deux phases liquides à partir de 15% vol. d'éthanol dans le mélange. On observe également l'apparition d'un nouveau phénomène : quand le taux de gazole et d'EMAG sont inférieurs à 30% vol., la solution devient trouble suite à la formation de cristaux. Enfin, à 10°C, les mélanges homogènes et clairs deviennent beaucoup plus rares tandis que la zone d'apparition de fluides troubles s'étend à tous les mélanges contenant moins de 60% vol. d'EMAG et plus de 5% vol. de gazole. Lorsque le taux d'EMAG est supérieur à 80% vol., il y a formation d'un gel visqueux. Ce phénomène n'est pas étonnant puisque le point d'écoulement des esters méthyliques d'huile de palme utilisés ici est supérieur à 10°C. On voit bien sur la Figure I-8 que la présence d'EMAG permet d'incorporer une quantité bien plus importante d'éthanol sans problème de démixtion à condition de garder un ratio éthanol/EMAG proche de 1. Néanmoins la solubilité des constituants des mélanges gazole/EMAG/éthanol diminue fortement lorsque la température baisse ou lorsque l'humidité augmente. Il est donc indispensable d'utiliser de l'éthanol anhydre et d'adapter la composition des mélanges en fonction du climat.

### 3.3.2 Viscosité

La viscosité cinématique traduit la résistance qu'opposent les molécules à une force tendant à les déplacer les unes par rapport aux autres. Cette grandeur s'exprime en Stokes ($m^2.s^{-1}$). et a une incidence directe sur le fonctionnement du moteur Diesel. En effet, un carburant trop visqueux augmente les pertes de charge dans la pompe et les injecteurs, ce qui détériore la finesse de pulvérisation et affecte le processus de combustion. A l'inverse, un carburant trop fluide augmente le risque de fuite et peut provoquer le grippage de la pompe d'injection [68]. Pour cette raison, la norme Européenne EN 590 définit une plage de viscosité à 40°C que les carburants doivent impérativement respecter (2 à 4,5 $mm^2.s^{-1}$). L'addition d'éthanol dans le gazole fait chuter la viscosité de ce dernier [24,69] ce qui peut entraîner des fuites plus importantes au niveau des pompes et des injecteurs. Le débit volumique réel est donc réduit et cela peut se traduire par une légère baisse de la puissance du moteur. Ce problème peut être amplifié lorsque le moteur est chaud puisque la viscosité du fluide diminue encore lorsque la température augmente [24].

Il est indispensable d'ajouter un additif au mélange gazole/éthanol pour le rendre plus visqueux et compatible avec les moteurs Diesel [52]. L'EMAG peut parfaitement remplir ce

rôle puisque les esters méthyliques d'huiles végétales qui le composent ont une viscosité supérieure à celle du gazole (cf. Tableau I-1). L'ajout de biodiesel dans le mélange compense donc la perte de viscosité due à l'éthanol et permet l'obtention d'un carburant aux propriétés proches de celles du gazole commercial [65,66]. La Figure I-9 représente la viscosité cinématique de plusieurs mélanges gazole/EMAG/éthanol à 40°C. On voit bien qu'il y a un effet synergique entre l'EMAG et l'éthanol qui améliore les propriétés d'écoulement des mélanges ternaires par rapport aux mélanges gazole/éthanol (pas assez visqueux) ou gazole/EMAG (trop visqueux) [70].

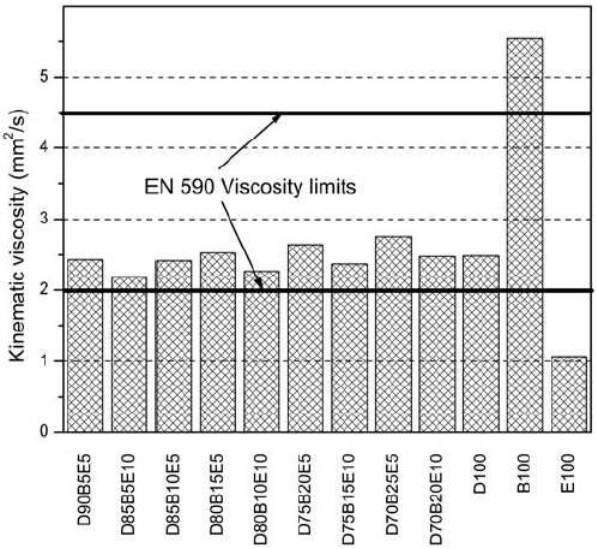



Figure I-9 : Viscosité à 40°C de mélanges gazole/EMAG/éthanol (% vol.), [70]

### 3.3.3 Pouvoir lubrifiant

La diminution de la viscosité du carburant s'accompagne également d'une dégradation de son pouvoir lubrifiant [24,69]. En effet, l'éthanol est un très mauvais lubrifiant qui va nuire au fonctionnement du système d'injection Diesel et accélérer l'usure des matériaux [71,72]. Le pouvoir lubrifiant des carburants peut être mesuré à l'aide d'essais sur machine à mouvement alternatif haute fréquence (HFRR). Cette méthode permet d'étudier le diamètre d'usure obtenu par frottement de deux surfaces en fonction du liquide utilisé à 60°C. Plusieurs auteurs préconisent l'utilisation d'additifs industriels pour améliorer le pouvoir lubrifiant de ces mélanges [63,71,72]. Néanmoins, l'EMAG est connu pour être un excellent lubrifiant et peu tout à fait être utilisé pour compenser la perte de pouvoir lubrifiant due à l'éthanol [63,70]. La Figure I-10 montre le diamètre d'usure en µm pour différents mélanges gazole/EMAG/éthanol. Dans tous les cas, les mélanges respectent les spécifications de la norme européenne EN590 qui autorise un diamètre d'usure maximum de 460 µm.

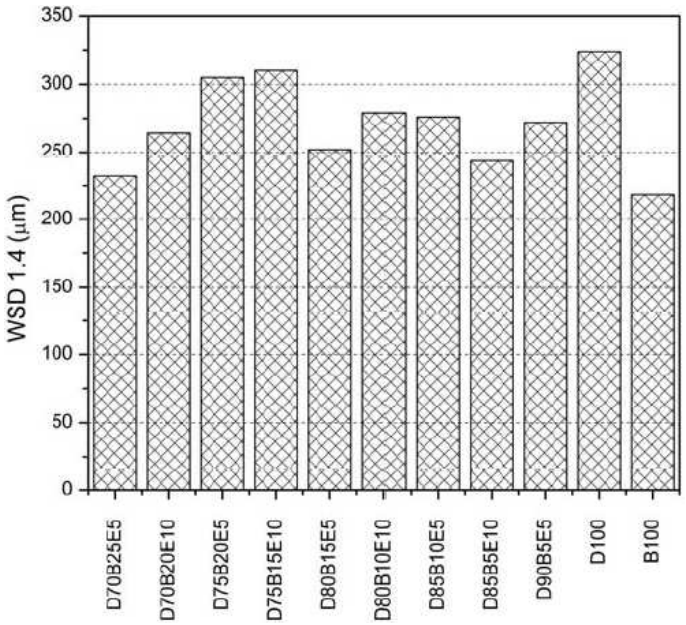



Figure I-10 : Pouvoir lubrifiant de différents mélanges gazole/EMAG/ethanol

## 3.3.4 Masse volumique

La masse volumique d'un gazole est un paramètre important qui a un effet direct sur la masse de carburant injecté et sur la qualité de l'atomisation. Pour cette raison, la norme EN 590 fixe une plage de masse volumique à 15°C que tous les gazoles européens se doivent de respecter (820 à 845 $kg.m^{-3}$). La fixation d'une valeur minimale se justifie par le souci d'obtenir une puissance suffisante pour le moteur. La limite maximale sert à limiter la formation de fumées qui seraient dues à un accroissement de la richesse moyenne dans la chambre de combustion [68]. L'ajout d'éthanol dans le gazole fait chuter la densité du mélange. L'EMAG étant un mélange d'esters méthyliques à 18 carbones en moyenne, il augmente la masse volumique du gazole lors du mélange. Il y a donc à nouveau un effet synergique entre l'EMAG et l'éthanol qui permet l'obtention d'un mélange ternaire ayant une masse volumique plus proche de celle du gazole traditionnel que celle des mélanges gazole/éthanol (pas assez dense) et gazole/EMAG (trop dense) [70]. Ce phénomène est illustré par la Figure I-11.

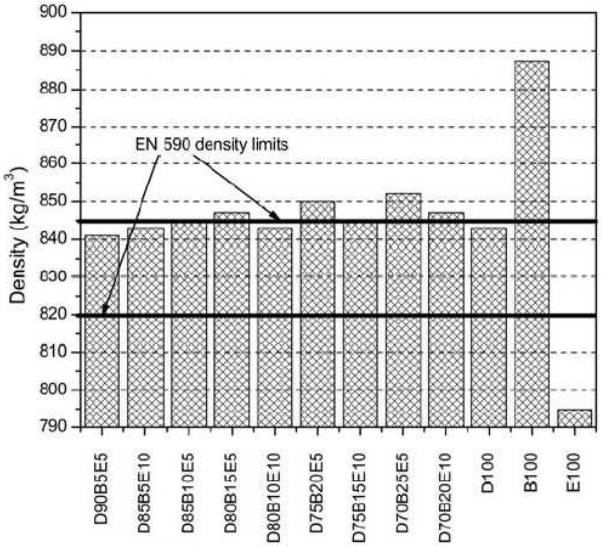



Figure I-11 : Masses volumiques de mélanges gazole/EMAG/éthanol à 15°C (% vol.), [70]

### 3.3.5 Indice de cétane

L'indice de cétane est l'un des principaux indicateurs de la qualité du gazole. Il caractérise le délai d'auto-inflammation du carburant au moment de son injection dans la chambre de combustion. Comme il n'existe pas d'unité dans laquelle exprimer cette caractéristique, on procède par analogie en comparant le comportement du carburant à celui d'un mélange de cétane (n-hexadécane s'auto-enflammant très facilement et ayant l'indice 100) et d'α-méthylnaphtalène (s'auto-enflammant très difficilement et ayant l'indice 0) dans un moteur CFR. On obtient ainsi une échelle allant de 0 à 100. Plus le délai d'auto-inflammation est court, plus l'indice de cétane est élevé et vice versa. Un indice de cétane élevé facilite le démarrage à froid et réduit le bruit de fonctionnement au ralenti. L'indice de cétane d'un gazole européen doit être supérieur à 51 (cf. Tableau I-1). L'éthanol est un composé peu enclin à s'auto-enflammer, son indice de cétane est difficilement mesurable car l'incertitude sur la mesure augmente grandement pour les indices très faibles, mais on estime qu'il est de l'ordre de 5 à 15 [24]. Donc, plus la concentration en éthanol augmente dans le mélange, plus l'indice de cétane du carburant diminue (cf. Figure I-12) [52]. C'est l'un des problèmes majeurs des mélanges éthanol/gazole puisque lorsque cet indice passe en dessous du seuil de 40, on considère qu'un carburant est difficilement utilisable dans un moteur Diesel conventionnel.

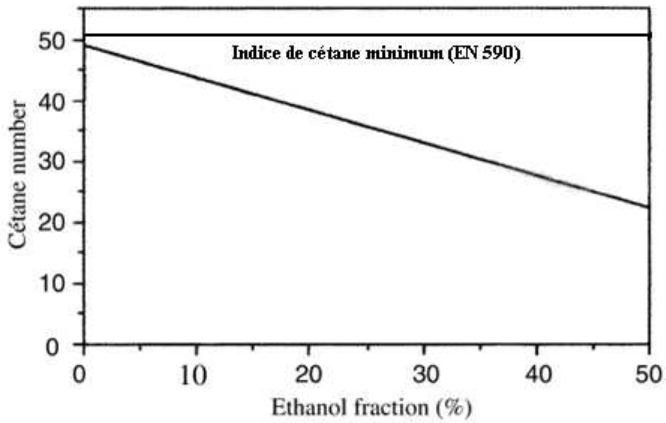



Figure I-12 : Effet de l'éthanol sur l'indice de cétane du carburant (% vol.), [52]

Pour assurer la viabilité des mélanges gazole/éthanol, il est donc indispensable d'augmenter l'indice de cétane à l'aide d'un additif. Les plus fréquemment cités dans la littérature sont le 2-éthyle hexyle nitrate [37,46], le di-tert-butyl peroxyde [63] et l'iso-octyle nitrate [73]. Satgé de Caro et al. [52] ont pu rehausser l'indice de cétane d'un carburant à l'aide de deux additifs synthétisés dans leur laboratoire**.** L'utilisation d'additifs industriels a cependant un double inconvénient. Tout d'abord, le prix élevé de ces produits de synthèse est assez dissuasif. D'autre part, l'utilisation à grande échelle des mélanges gazole/éthanol nécessiterait l'emploi d'un additif disponible en grande quantité, à faible coût et si possible d'origine biologique. Malheureusement, l'EMAG, avec son indice de cétane proche de 51, ne suffit pas à compenser la présence de fractions importantes d'éthanol dans le mélange. La solution proposée par IFP Energies nouvelles pour arriver à un cétane voisin d'un gazole conventionnelle est la substitution du gazole pétrolier par un carburant issu d'une coupe paraffinique à fort cétane (F-T ou HVO) [74-76]. Cette solution est particulièrement intéressante car elle permet l'obtention d'un carburant d'origine 100% biologique qui conserve un indice de cétane satisfaisant malgré l'ajout de quantités importantes d'éthanol (jusqu'a 30% vol.).

### 3.3.6 Pouvoir calorifique

Le Pouvoir Calorifique Inférieur (PCI) représente la quantité d'énergie dégagée par unité de masse ou de volume d'un carburant lors de la réaction chimique de combustion complète conduisant à la formation de dioxyde de carbone et d'eau sous forme gazeuse. Cette propriété a une influence directe sur la puissance dégagée par le moteur. Il est donc important que les mélanges gazole/éthanol conservent au moins 90% de l'énergie globale du gazole commercial pour assurer un travail efficace du moteur. L'éthanol est 33% moins énergétique que le gazole (en masse), le contenu énergétique des mélanges gazole/éthanol chute donc approximativement de 2% pour chaque tranche de 5% vol. d'éthanol ajoutée [24]. L'EMAG est 3,5% moins énergétique que le gazole et ne peut donc pas compenser la présence de

l'éthanol dans le carburant (cf. Tableau I-1) [30]. Néanmoins, pour des volumes raisonnables de composés oxygénés (<30%), la perte énergétique n'excède pas un faible pourcentage, ce qui n'entraîne pas de changement important de la puissance dégagée. Le seul effet visible de la perte énergétique due à l'ajout d'éthanol est l'augmentation logique de la consommation du véhicule.

La substitution du gazole par un carburant de type F-T ou HVO permet de très légèrement minimiser l'impact de l'ajout d'éthanol sur le contenu énergétique du carburant. En effet, le gazole synthétique a un PCI massique très légèrement supérieur à celui du gazole traditionnel (cf. Tableau I-1). Cependant, la différence est minime et ne permet en aucun cas de compenser la perte d'énergie globale due à l'ajout de volumes importants d'éthanol.

# 4. Impact des mélange gazole/éthanol sur les performances du moteur

La présence d'éthanol induit des changements importants lors du processus de combustion. Ces modifications sont susceptibles de perturber le bon fonctionnement du moteur Diesel. Il est donc important de comprendre l'effet de l'éthanol sur la combustion afin d'adapter au mieux certains paramètres du moteur et obtenir les meilleures performances.

## 4.1 Effet sur la combustion

Les mélanges gazole/éthanol ont un délai d'auto-inflammation supérieur à celui du gazole commercial. Ceci est dû au faible indice de cétane de l'éthanol qui retarde l'auto-inflammation du carburant. Ce phénomène est plus marqué à faible charge, où la forte enthalpie de vaporisation de l'éthanol a un effet inhibiteur sur la réactivité, qu'à forte charge où la température importante dans la chambre de combustion minimise l'importance de l'indice de cétane. L'éthanol entraîne également une réduction importante de la durée totale de combustion. En effet, le grande quantité d'oxygène contenue dans l'éthanol favorise l'oxydation des hydrocarbures et accélère donc la combustion.

## 4.2 Consommation

Pour mesurer la consommation moyenne en carburant, on introduit la notion de BSFC (pour Brake Specific Fuel Consumption). Cette grandeur permet de mesurer la masse de carburant consommé par kWh d'énergie produite par le moteur selon l'équation I-1.

$$b.s.f.c. = \left( \frac{V_f \rho_f}{P} \right) 3{,}6.10^9 \text{ (en g/kW h)} \qquad \text{(E I-1)}$$

Avec P puissance effective du moteur (W)

$V_f$ volume de carburant introduit (en $m^3$)

$\rho_f$ masse volumique du carburant (en $kg/m^3$)

La BSFC augmente avec le pourcentage d'éthanol dans le mélange, quelles que soient les conditions expérimentales. Ces résultats peuvent être expliqués par la faible densité énergétique de l'éthanol par rapport au gazole (cf. Tableau I-1). La perte d'énergie du carburant due au remplacement d'une partie du gazole par de l'éthanol se traduit logiquement par une plus grande consommation pour produire un travail équivalent [26,41,42,67,69,77,78]. Une seconde explication à ce phénomène est l'augmentation du délai d'auto-inflammation du mélange, qui peut conduire à une combustion incomplète et donc, à une augmentation de la quantité de carburant nécessaire au bon fonctionnement du moteur. Ce phénomène permet d'expliquer pourquoi l'augmentation de la consommation est plus importante à faible charge où l'indice de cétane inférieur de l'éthanol retarde l'auto-inflammation du mélange, qu'à forte charge où la température importante dans la chambre de combustion minimise l'importance de l'indice de cétane.

## 4.3 Rendement thermique

Le rendement thermique ou BTE (pour Brake Thermal Efficiency) est le rapport entre le travail produit par le moteur et l'énergie contenue dans le carburant consommé. Il peut être calculé à l'aide de l'équation I-2 :

$$b.t.e = \frac{W}{V_f \ \rho_f \ \Theta} \qquad \text{(E I-2)}$$

Avec W énergie effective fournie par le moteur (J)

$V_f$ volume de carburant introduit (en $m^3$)

$\rho_f$ masse volumique du carburant (en $kg.m^{-3}$)

$\Theta$ pouvoir calorifique inférieur du carburant ($J.kg^{-1}$)

Plusieurs études ont observé un BTE identique ou très légèrement supérieur à celui du gazole traditionnel lors de la combustion de mélanges gazole/éthanol [26,59,69,79-82]. Cette légère amélioration du rendement thermique peut être expliquée par trois phénomènes :

- La forte volatilité de l'éthanol couplée à son faible indice de cétane entraîne une meilleure homogénéisation des gaz et améliore la combustion en pré-mélange.
- L'augmentation importante de la quantité d'oxygènes (apportée par l'éthanol) dans le carburant permet une combustion plus complète dans les zones riches du mélange.
- La forte enthalpie de vaporisation de l'éthanol entraîne une baisse de température de la flamme d'hydrocarbure. Les pertes de chaleur aux parois de la chambre de combustion sont ainsi minimisées.

# 4.4 Émissions polluantes

## 4.4.1 Monoxyde de carbone

Le monoxyde de carbone est l'un des principaux polluants générés par le transport routier. C'est un composé toxique issu de la combustion incomplète des hydrocarbures.

Les effets des mélanges gazole/éthanol sur les émissions de monoxyde de carbone sont assez complexes. Néanmoins, la plupart des études s'accordent sur le comportement typique de ce genre de composé. Il est clair que pour une charge faible ou moyenne l'addition de composés oxygénés augmente les émissions de CO [43]. De nombreux travaux montrent que pour de fortes charges, les émissions de CO diminuent avec l'augmentation de la teneur en éthanol [26,27,44,49,66,69]**.** Ce phénomène peut être expliqué en deux temps. A faible charge, la température est trop faible pour permettre une combustion efficace de l'éthanol (qui a une grande chaleur latente de vaporisation). Cela entraîne donc une diminution du taux d'oxydation du CO. A plus forte charge, la température élevée dans le cylindre augmente la cinétique d'oxydation du carburant. L'augmentation du taux d'oxygène dans le mélange permet une combustion plus complète et une réduction des émissions de CO. Il est important de noter que la présence d'EMAG dans le mélange rend la combustion plus facile et réduit donc les émissions de CO dans toutes les conditions expérimentales [27,45,47].

Certaines études trouvées dans la littérature contredisent les résultats précédents. Satgé De Caro et al. [52] et Pang et al. [47] n'observent aucun changement significatif entre le gazole et les mélanges éthanol/gazole concernant les émissions de CO. De leur coté, He et al. [73] observent une légère augmentation des émissions de CO quelles que soient les conditions expérimentales. Enfin, les résultats de Shi et al. [64] et Can et al. [30] indiquent une diminution de la concentration en CO dans la plupart des cas de figures.

## 4.4.2 Hydrocarbures imbrûlés

Les hydrocarbures imbrûlés (HC) sont principalement formés lors de la combustion d'hydrocarbure en milieu riche et/ou à faible température. Ces polluants sont toxiques et peuvent avoir un fort impact sur l'effet de serre.

La plupart des études s'accordent sur le fait que l'ajout d'éthanol dans le gazole augmente les émissions d'hydrocarbures imbrûlés lors de la combustion [26,66,69,83]**.** Cette augmentation peut s'expliquer pour plusieurs raisons. Bien que l'éthanol apporte plus d'oxygène au carburant (ce qui facilite l'oxydation des hydrocarbures), il possède une chaleur latente d'évaporation bien plus élevée que celle du gazole, ce qui fait chuter la température de flamme et favorise la formation d'hydrocarbures [45]. Une autre explication plausible est la faible miscibilité de l'éthanol et du gazole qui entraîne la formation de zones très riches où la combustion ne peut avoir lieu de façon efficace [83]. Il faut cependant noter que certaines

études n'ont révélé aucun changement significatif dans les émissions d'hydrocarbures imbrûlés suite au mélange gazole/éthanol [31,41,42,80].

### 4.4.3 Oxydes d'azote

La famille chimique des oxydes d'azote (NOx) regroupe deux polluants distincts: le monoxyde d'azote (NO) et le dioxyde d'azote (NO2). Le NO se forme majoritairement par réaction entre l'azote et l'oxygène de l'air dans la zone de gaz brulés en aval du front de flamme selon le mécanisme de Zeldovich (cf. réactions I-4 à I-6). Il faut cependant noter que l'énergie d'activation de la première réaction est très élevée. Par conséquent, ce processus est très dépendant de la température.

$$N_2 + O \rightarrow NO + N \qquad \text{(R.I-4)}$$

$$N + O_2 \rightarrow NO + O \qquad \text{(R. I-5)}$$

$$N + OH \rightarrow NO + H \qquad \text{(R. I-6)}$$

Cependant le mécanisme de Zeldovich (aussi appelé "NO thermique") n'est pas suffisant pour expliquer la totalité des NOx formés lors de la combustion (notamment à faible température). En réalité, une partie du NO peut provenir de l'oxydation de carburants contenant de l'azote (additifs par exemple) via le mécanisme de "fuel NO". Il existe également un troisième mécanisme, appelé "NO précoce", qui décrit la formation de NO par réaction de l'azote de l'air avec les radicaux formés lors de l'oxydation du carburant ($CH_2$, CH, C...) dans des zones ou le NO thermique n'a pas eu le temps de se former. Le monoxyde d'azote formé selon ces trois processus peut ensuite s'oxyder en dioxyde d'azote selon la réaction I-7 :

$$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH \qquad \text{(R. I-7)}$$

Les émissions de NOx formés suite à la combustion de mélanges gazole/éthanol dépendent fortement des conditions expérimentales. Les nombreuses études menées sur le sujet aboutissent le plus souvent à des résultats contradictoires. Certains résultats expérimentaux tendent à prouver que la présence d'éthanol dans le carburant n'affecte quasiment pas les émissions de NOx [41,42,73,80,83]. D'autres études arrivent à la conclusion que les composés oxygénés réduisent les émissions de NOx des véhicules Diesel de façon significative [26,27,52,69]. Cette amélioration peut être expliquée par la forte chaleur latente de vaporisation de l'éthanol et par la diminution de la densité énergétique du carburant. Ces deux paramètres entraînent une baisse de la température de combustion, et donc, une inhibition de la formation du "NO thermique". D'autres études arrivent à une conclusion [30,44,49,64,66]. Can et al. [30] pensent que cette augmentation est principalement due à la diminution de l'indice de cétane du carburant. Un indice de cétane inférieur entraîne un plus long délai d'auto-inflammation et un dégagement de chaleur plus important lors de la combustion de pré-mélange. Cette augmentation rapide de la température est favorable à la formation des NOx.

### 4.4.4 Particules

La présence de zones localement riches dans la chambre de combustion des moteurs Diesel entraîne la formation d'espèces poly-aromatiques de plus en plus volumineuses par oxydation partielle du carburant à haute température. Suite à une étape de nucléation, ces espèces vont quitter la phase gazeuse pour former des particules solides qui vont coaguler entre elles et former des suies. Des espèces gazeuses vont alors se condenser à la surface de ces suies et participer à la croissance des particules [84,85]. Pour simplifier, on considère souvent que les particules sont principalement constituées de suies (DS pour Dry Soot), de sulfates et d'une fraction organique soluble (SOF pour Soluble Organic Fraction) [49]. Les particules représentent un risque sanitaire majeur car elles peuvent pénétrer dans les voies respiratoires et favoriser l'apparition de cancers [86].

La majorité des études s'accordent sur le fait que l'augmentation de la fraction d'éthanol dans le carburant réduit les émissions de particules de manière significative [43-45,49,64,83]. Cette réduction s'explique facilement par 2 phénomènes :

- l'augmentation du taux d'oxygène dans le mélange permet une oxydation plus complète des hydrocarbures dans les zones riches de la chambre de combustion, empêchant ainsi la formation des particules [87]. L'EMAG étant également un oxygéné, il permet aussi de réduire les émissions de particules. Cependant, la teneur volumique en oxygène de l'éthanol est nettement plus importante que celle des esters méthyliques. De plus, l'atome d'oxygène de la fonction alcool semble plus facilement mobilisable que ceux de la fonction ester [88,89].
- la présence d'éthanol augmente la volatilité du carburant et favorise l'homogénéité du mélange. Il y a donc moins de zones locales très riches favorables à la formation de suies.

L'incorporation de composés oxygénés dans le gazole influence fortement la composition des particules formées lors de la combustion. La Figure I-13 représente la composition moyenne des particules issues de la combustion d'un gazole fortement soufré (E0) et de mélanges éthanol/gazole E10B, E20B et E30B contenants respectivement 10, 20 et 30% vol. d'éthanol. Lorsque l'on augmente la quantité d'éthanol dans le mélange, la proportion de suies diminue fortement. Elle passe de 79% pour E0 à 12% pour E30B. La fraction soluble croît fortement avec l'ajout de composés oxygénés. Elle passe de 18% pour E0 à 78% pour E30B. Le pourcentage de sulfates dans les particules ne varie pas beaucoup et reste en dessous de 10% quel que soit le mélange [45]. Il est important de noter qu'en raison des normes de plus en plus drastiques sur le taux de soufre maximum dans le gazole, la proportion de sulfates au sein des particules ne cesse de diminuer ces dernières années. La composition des particules joue un rôle important dans le choix du post-traitement des polluants. La partie organique soluble peut facilement être éliminée par catalyse tandis que les

suies sont plus complexes à traiter. De ce point de vue, les mélanges éthanol/gazole peuvent faciliter la régénération des particules [45,50].

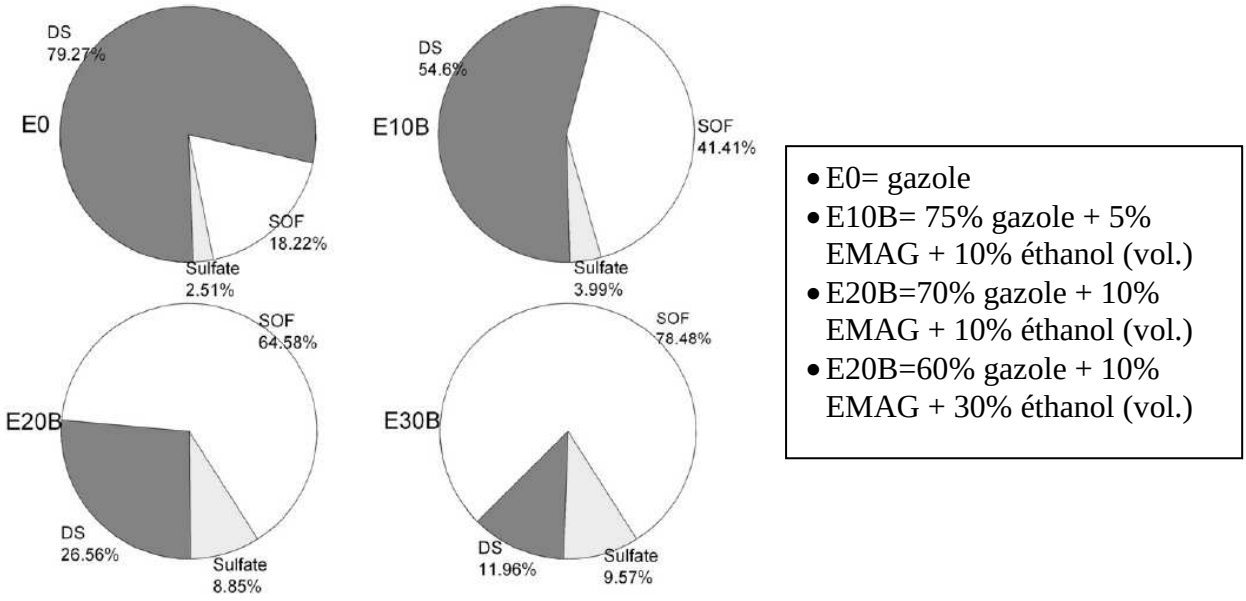



Figure I-13 : Impact de l'éthanol sur la composition des suies [45]

Les mélanges gazole/éthanol influent également sur la distribution en taille des particules rejetées. Les diverses expériences menées sur le sujet montrent un décalage du diamètre moyen des particules formées lors de l'oxydation de mélanges éthanol/gazole vers des valeurs plus petites [34-36,43,46,80]. Cela peut sembler préoccupant à première vue. En effet, lorsque la taille des particules diminue, elles ont une plus grande surface spécifique et peuvent pénétrer plus profondément dans le système respiratoire. Cependant, Lapuerta et al. [80] et Di et al. [36] arrivent à la conclusion qu'il n'y a pas d'augmentation de la formation des particules de petite taille avec ce type de carburant mais plutôt une meilleure oxydation des particules de grande taille ce qui crée un décalage dans la distribution des diamètres de suie.

## 4.6 Optimisation

Les émissions polluantes d'un moteur Diesel dépendent fortement de sa calibration. L'optimisation de certains paramètres (pression et phasage d'injection, taux d'EGR...) va permettre de mettre à profit les propriétés du mélange afin de minimiser les émissions d'un véhicule utilisant un mélange éthanol/gazole.

La recirculation d'une partie des gaz brulés dans le cylindre permet de faire chuter la température de combustion et donc de minimiser la formation des NOx. Cependant, le remplacement d'une partie de l'air par ces gaz entraîne également une augmentation de la richesse locale, favorisant ainsi la formation des particules. Le but est donc de trouver le meilleur compromis possible entre les émissions de NOx et de particules en fonction du carburant utilisé et des conditions opératoires.

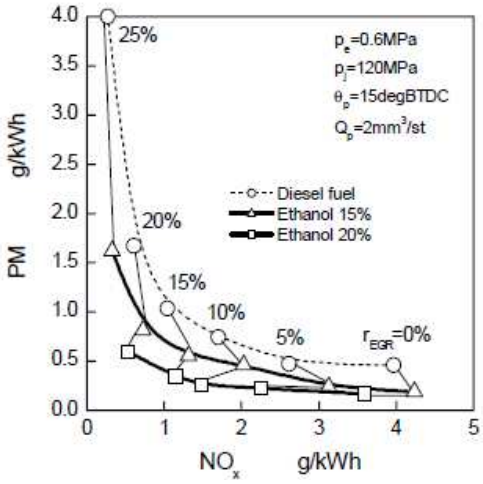



Figure I-14 : Effet du taux d'EGR sur le compromis NOx/PM pour 2 mélanges gazole/éthanol

La Figure I-14 représente l'effet du taux d'EGR sur les émissions de NOx et de particules pour un gazole traditionnel et deux mélanges éthanol/gazole contenant respectivement 15 et 20% d'éthanol en volume. Pour le gazole conventionnel, une augmentation du taux d'EGR au delà de 15% entraîne un accroissement trop important des suies pour que ce processus soit réellement intéressant. Les mélanges éthanol/gazole permettent de réduire fortement les rejets de particules. Ce type de carburant permet donc la mise en place d'un fort taux d'EGR sans pour autant dégrader les émissions de particules. Par exemple, sur la Figure I-14, le mélange contenant 20% vol. d'éthanol utilisé avec un taux d'EGR de 20% permet d'émettre seulement 0,5g de particules et 0,5g de NOx par kWh alors que le gazole pur entraîne des émissions de l'ordre de 1,5g de particules et 0,8g de NOx dans les mêmes conditions. Cet excellent compromis entre les émissions de NOx et de particules est l'un des principaux avantages des mélanges gazole/éthanol [33,66].

# 5. Conclusion

Le déséquilibre de la balance pétrolière française aboutit à une situation inconfortable : un surplus important d'essence et un sérieux manque de gazole. L'ajout d'éthanol dans le pool essence ne fait qu'accroitre ce déséquilibre. Dans ce contexte, il semble intéressant d'intégrer l'éthanol dans un carburant de type gazole afin d'équilibrer les consommations gazole/essence.

Certaines propriétés physico-chimiques des mélanges binaires gazole/éthanol rendent leur utilisation incompatible avec un bon fonctionnement des moteurs à allumage par compression. Les principaux problèmes liés à l'utilisation de ce type de mélange sont la faible miscibilité de l'éthanol et du gazole et la diminution de l'indice de cétane du carburant.

La faible miscibilité de l'éthanol et du gazole peut entraîner des problèmes de démixtion du mélange. La solution choisie pour résoudre cette difficulté est l'utilisation d'EMAG comme co-solvant. En effet, la nature amphiphile des esters méthyliques permet une stabilisation efficace des mélanges gazole/EMAG/éthanol. En outre, la présence d'EMAG permet de

compenser les effets de l'éthanol au niveau de la masse volumique, de la viscosité et du pouvoir lubrifiant et permet l'obtention d'un mélange ternaire aux caractéristiques très proches de celles du gazole traditionnel.

L'ajout d'une quantité importante d'éthanol dans le gazole s'accompagne également d'une diminution problématique de l'indice de cétane du mélange. Cela peut se traduire par une combustion de mauvaise qualité sur certaines plages de fonctionnement du moteur Diesel. La substitution du gazole par un carburant F-T ou HVO à fort cétane permet la formulation d'un biocarburant respectant les normes européennes d'auto-inflammation, même pour des volumes importants d'éthanol (20%).

Toutes les études trouvées dans la littérature s’accordent sur le fait que l’utilisation de mélanges gazole/EMAG/éthanol, avec des proportions raisonnables de composés oxygénés (typiquement moins de 30% du volume total), n’entraîne aucun problème majeur de fonctionnement des moteurs Diesel. La forte volatilité et le faible cétane de l'éthanol engendrent une flamme de pré-mélange plus tardive et intense tandis que l'augmentation du taux d'oxygène dans le carburant accélère la combustion diffusive. La diminution de l'indice de cétane du carburant se traduit également par un léger déclin de la puissance du moteur. Cependant, cette diminution est surtout visible à faible charge pour des mélanges fortement enrichis en éthanol. En revanche, bien que le rendement thermique reste sensiblement équivalent à celui obtenu avec du gazole traditionnel, la perte de contenu énergétique du carburant entraîne logiquement une augmentation de la consommation volumique pour un travail équivalent.

Au final, la formulation de mélanges ternaires F-T/EMAG/éthanol permet l'obtention d'un biocarburant d'origine 100% biologique ayant des propriétés physico-chimiques très proches de celles du gazole commercial. C'est donc un biocarburant possédant un fort potentiel pour une application en moteur Diesel.

# Chapitre II
# Choix d’un carburant modèle pour la combustion de biocarburants

# 1. Introduction

L’adéquation des carburants avec les moteurs est un objectif majeur pour les pétroliers et l’industrie automobiles. Les recherches récentes sur l’utilisation de biocarburants dans le domaine du transport ont relancés l’intérêt du développement de modèles de combustion intégrant une description détaillée de la chimie réactive. En effet, cette étape s’avère déterminante pour améliorer la performance, la consommation et les émissions polluantes de moteurs utilisant des carburants nouveaux, issus de la biomasse.

En raison de la complexité de la composition des carburants commerciaux, des carburants modèles sont développés afin de permettre une meilleure compréhension des phénomènes physico-chimiques de combustion. Ces carburants modèles sont une représentation simplifiés des carburants réels. Ils sont composés de quelques espèces choisies de manière à représenter les caractéristiques physico-chimiques des carburants commerciaux avec des temps de calcul raisonnables.

Dans le chapitre précédent, nous avons identifié les mélanges F-T/EMAG/éthanol comme étant potentiellement intéressant pour une application en moteur Diesel. L’objectif de ce chapitre est d’expliquer la méthodologie mise en place durant ce travail de thèse afin de sélectionner des espèces modèles représentatives des caractéristiques thermodynamiques (volatilité, densité…) et chimiques (composition, indice de cétane…) de ce type de mélange. Un état de l’art sur les mécanismes cinétiques d’oxydation des alcanes, des esters méthyliques et de l’éthanol sera également présenté ainsi que la démarche globale de modélisation appliquée au cours de ce travail de thèse.

# 2. Méthodologie de construction d'un carburant modèle

La modélisation cinétique est une étape très importante pour comprendre les mécanismes réactionnels mis en jeu lors des processus de combustion et pour prévoir le comportement des réactifs dans des conditions difficilement réalisables expérimentalement. Les récents progrès informatiques ont permis la création de modèles de plus en plus détaillés tout en conservant des temps de calcul raisonnables.

Néanmoins, dans le cadre d'une modélisation cinétique, il n'est pas possible de prendre en compte toutes les espèces chimiques présentes dans le carburant. Des choix de modélisation s'avèrent nécessaires afin de réduire la taille du mécanisme et d'optimiser le temps de calcul. Il faut donc choisir des espèces clés permettant de reproduire la réactivité du carburant réel. Dans le cas d'un mélange ternaire F-T/EMAG/éthanol, le comportement cinétique de chacun des trois composants doit être simulé.

La formulation de mélanges d’espèces modèles représentatives des propriétés physico-chimiques a déjà fait l’objet de nombreuses études concernant les carburants traditionnels ;

que ce soit pour l'essence [90,91] , le gazole [90,92] ou le kérosène [93]. Néanmoins, il reste beaucoup de recherche à faire concernant la mise au point d'espèces modèles pour les carburants issus de la biomasse. La méthodologie de construction du carburant modèle utilisée au cours de cette thèse repose sur 3 étapes successives :

- Etape 1 : on procède à une analyse détaillée du carburant commercial (GtL, EMAG, éthanol…) afin de connaitre précisément sa composition chimique et ses propriétés thermodynamiques.
- Etape 2 : on identifie les familles chimiques majoritaires dans le carburant commercial (n-alcane, iso-alcane, aromatiques, etc…).
- Etape 3 : on cherche, parmi les familles chimiques identifiées lors de l'étape précédente, des molécules dont le mélange fournit des caractéristiques physico-chimiques proches du carburant initial.

Nous nous sommes limités à une espèce par famille chimique identifiée afin de ne pas surcharger le modèle cinétique. Parmi les propriétés physico-chimiques du carburant initial nous avons fait en sorte que notre modèle respecte au maximum l'indice de cétane (afin de simuler convenablement l'auto-inflammation) et les rapports C/H et C/O pour garder une masse molaire moyenne et une corrélation correcte avec la vitesse de flamme laminaire du carburant initial. Dans la pratique, la sélection des espèces chimiques lors de l'étape 3 est limitée pour plusieurs raisons :

- Les molécules choisies doivent être disponible à un coût raisonnable afin de pouvoir étudier leur oxydation en réacteur auto-agité.
- La taille des espèces choisies doit être raisonnable afin de limiter la taille des mécanismes cinétiques et de faciliter les expériences en réacteur auto-agité. En effet les espèces lourdes restent difficilement en phase homogène ce qui rend leur étude difficile en réacteur auto-agité.
- Nous nous sommes focalisé sur des espèces ayant déjà fait l'objet d'études cinétiques par le passé afin de disposer de nombreuses données expérimentales pour valider notre mécanisme cinétique.

## 2.1 Choix d'espèces modèles représentatives du GtL

Les carburants F-T sont des mélanges de n-paraffines et d'iso-paraffines obtenus à partir de gaz de synthèse grâce à un procédé Fisher-Tropsch. La matière première pour générer le gaz de synthèse nécessaire à la production de ce carburant alternatif peut être le charbon, le gaz naturel ou la biomasse. Le nom du carburant produit par ce procédé varie donc en fonction de la matière première utilisée : on parle de CtL (Coal to Liquid), GtL (Gaz to

Liquid) ou BtL (Biomasse to Liquid). Le carburant utilisé au cours de nos essais moteur étant du GtL, notre carburant modèle a été définit à partir de l'analyse de ce carburant.

La Figure II-1 donne la composition chimique du GtL utilisé au cours de cette étude. L'analyse détaillée révèle qu'il s'agit d'un mélange complexe contenant 35% mol. de n-alcanes et 65% mol. d'iso-alcanes comprenant 8 à 20 atomes de carbone. C'est un carburant possédant un indice de cétane très élevé (environ 85) et une densité de 0,778 à 15°C. On voit bien qu'il n'est pas possible de prendre en compte toutes les espèces chimiques présentes dans le GtL lors de la simulation numérique. On doit donc définir un carburant modèle représentant les principales familles d'hydrocarbures présentes dans le GtL : à savoir, les iso-alcanes et les n-alcanes. Dans notre cas :

- Le n-décane ($C_{10}H_{22}$) a été choisi pour représenter les alcanes linéaires contenus dans le GtL.
- Les alcanes ramifiés seront quant à eux représentés par l'iso-octane ($iC_8H_{18}$) qui est une molécule de référence ayant fait l'objet de nombreuses études.

Ces deux molécules ont déjà fait l'objet de multiples études cinétiques, ce qui nous permettra de valider notre modèle face à de nombreuses données expérimentales disponibles dans la littérature. De plus, l'existence de plusieurs schémas cinétiques d'oxydation de ces deux composés nous permettra de comparer les prédictions de notre modèle face à celles des mécanismes développés par d'autres auteurs. Enfin, une étude récente de Mzé-Ahmed et al. [94] a déjà démontré la pertinence des mélanges n-décane/iso-octane pour simuler l'oxydation des carburants F-T.

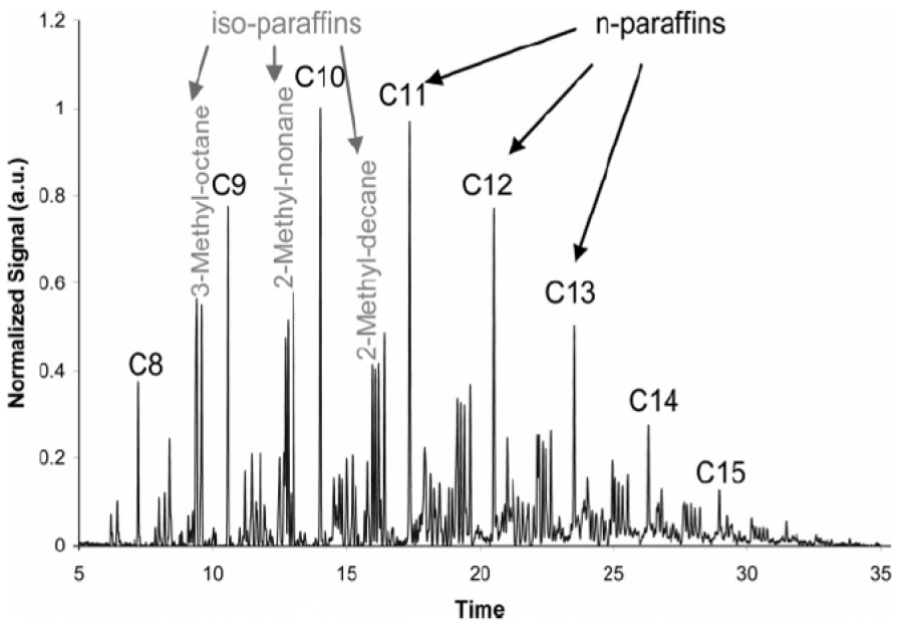



Figure II-1 : Composition du GtL utilisé au cours de cette étude obtenue par GC2D

Un mélange contenant 68 % mol. de n-décane et 32 % mol. d'iso-octane a donc été choisit pour représenter le GtL au cours de cette étude. En effet, ce mélange possède un indice de cétane et un rapport C/H très proches de ceux observés pour GtL. On remarque que le pourcentage molaire d'iso-alcane est plus faible dans le carburant modèle que pour le GtL (32% contre 65% respectivement). Ceci s'explique par le fait que l'iso-octane est une molécule fortement ramifiée, contrairement aux constituants du GtL qui sont le plus souvent de longues chaines carbonés comprenant une seule ramification. L'impact de l'iso-octane sur l'indice de cétane du mélange est donc bien plus prononcé que celui des iso-alcanes constituant le GtL et il nous a fallut réduire la quantité d'iso-alcane dans le mélange afin de représenter convenablement l'auto-inflammation du carburant de référence.

## 2.2 Choix d'espèces modèles représentatives de l'EMHC

L'EMAG principalement utilisé en France est un mélange d'esters méthyliques d'huile de colza. C'est donc l'ester méthylique d'huile de colza (EMHC) qui a été retenue pour jouer le rôle du biodiesel dans notre matrice carburant. Ce biocarburant est majoritairement constitué d'esters méthyliques comprenant 19 atomes de carbone comme le montre le Tableau II-1.

Tableau II-1 : Composition des esters méthyliques en fonction de l'huile utilisée (% mass.)

| Huile | myristate de méthyle ($C_{15}H_{30}O_2$) | Palmitate de méthyle ($C_{17}H_{34}O_2$) | Stéarate de méthyle ($C_{19}H_{38}O_2$) | Oléate de méthyle ($C_{19}H_{36}O_2$) | Linoléate de méthyle ($C_{19}H_{34}O_2$) | Linolénate de méthyle ($C_{19}H_{32}O_2$) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Colza | 0 | 5 | 2,5 | 59 | 21 | 9 |
| Tournesol | 0 | 6 | 5 | 18 | 69 | 0 |
| Soja | 0 | 10 | 4 | 23 | 53 | 8 |
| Palme | 1 | 44 | 6 | 38 | 10 | 0 |
| Jatropha | 16 | 8 | 3 | 16 | 3 | 0 |

La taille des mécanismes cinétiques croît de manière quasi exponentielle lorsque le nombre de carbones des esters méthyliques augmente (cf. Tableau II-2). En effet, la présence d'une fonction ester en bout de chaine carbonée brise la symétrie de la molécule et contraint le modèle à prendre en compte un plus grand nombre d'isomères alkyles lors du processus d'amorçage de l'oxydation. De plus, la réactivité des esters méthyliques à longues chaînes carbonées est très proche de celle des alcanes linéaires correspondants [95]. Afin de ne pas surcharger le modèle, l'EMAG sera donc représenté à l'aide de deux molécules distinctes:

- un ester méthylique de taille réduite, l'octanoate de méthyle ($C_9H_{18}O_2$), représentatif de la chimie particulière des oxygénés.

- un alcane linéaire, afin de retrouver la masse molaire et le rapport C/O initial de l'EMAG. Afin de simplifier le modèle, il a été décidé que l'espèce représentant la partie n-paraffinique serait commune à la fois au F-T et à l'EMAG. Le n-décane ($C_{10}H_{22}$) a donc été choisi pour compléter l'octanoate de méthyle pour la simulation de l'EMHC.

Tableau II-2 : Nombre d'espèces et de réactions dans les mécanismes générés par EXGAS [96]

| Ester étudié | $C_9H_{18}O_2$ | $C_{11}H_{22}O_2$ | $C_{13}H_{26}O_2$ | $C_{15}H_{30}O_2$ | $C_{17}H_{34}O_2$ |
|---|---|---|---|---|---|
| Nombre d'espèces | 668 | 1159 | 1880 | 2877 | 4222 |
| Nombre de réactions | 3905 | 6956 | 11790 | 28791 | 41573 |

Un mélange contenant 50% mol. d'octanoate de méthyle et 50% mol. de n-décane a donc été utilisé afin de simuler les propriétés physico-chimique de l'EMHC au cours de ce travail de thèse. Ce mélange présente un indice de cétane, une masse molaire et un rapport C/O très proches de ceux de l'ester méthylique d'huile de colza. L'octanoate de méthyle et le n-décane ont déjà été utilisés avec succès pour simuler l'oxydation de biodiesel lors d'une étude de Ramirez et al. [97].

## 2.3 Mise au point du carburant modèle

Enfin, nous avons complété le carburant modèle à l'aide de l'éthanol afin de représenter la troisième partie de notre carburant initial. Au final, le mélange ternaire GtL/EMHC/éthanol sera donc simulé à l'aide de quatre espèces modèles : éthanol, octanoate de méthyle, n-décane et iso-octane (cf. Tableau II-3). Ces quatre composés ont déjà fait l'objet de modélisations cinétiques lors de travaux antérieurs.

Tableau II-3 : Espèces représentatives d'un mélange F-T/EMAG/éthanol

| Familles chimiques | espèces représentatives | formules brutes | formules développées |
|---|---|---|---|
| n-paraffines | n-décane | $C_{10}H_{22}$ | |
| iso-paraffines | iso-octane | $C_8H_{18}$ | |
| esters méthylique | octanoate de méthyle | $C_9H_{18}O_2$ | |
| alcool | éthanol | $C_2H_6O$ | |

L'objectif de cette thèse est la mise au point d'un mécanisme cinétique permettant de simuler la réactivité et la formation des polluants lors de la combustion d'un mélange ternaire F-T/EMAG/éthanol. L'oxydation de chacun des constituants du mélange devra être fidèlement

reproduite par le modèle ainsi que les éventuelles interactions entre les différents pools radicalaires.

# 3. État de l'art sur l'oxydation des hydrocarbures

Les nombreuses études menées sur la combustion des alcanes montrent que la cinétique d'oxydation de ces composés varie fortement avec la température [98,99] (cf. figure II-2). Une première oxydation, relativement lente, a lieu à basse température (< 650 K). Sa faible exothermicité lui a valu la dénomination de flamme froide. Le domaine de température légèrement supérieure, de l'ordre de 650 à 800 K, est appelé zone de coefficient négatif de température (NTC). Durant cette nouvelle phase, la réactivité diminue alors que la température augmente. Au delà de 800 K, l'oxydation devient beaucoup plus rapide à mesure que l'inflammation vraie se met en place. Cette nouvelle gamme de température est appelée domaine de haute température [100,101].

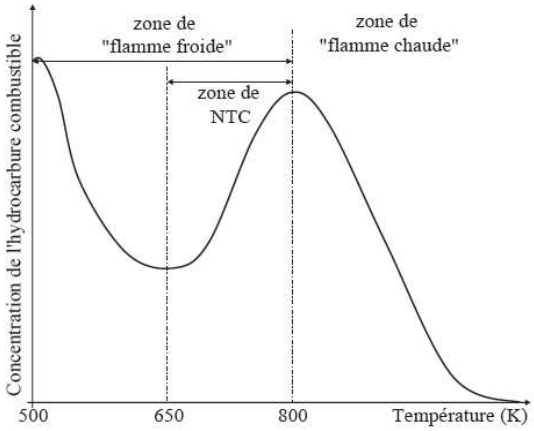



Figure II-2 : Variation des mécanismes d'oxydation avec la température [102]

## 3.1 Mécanisme d'oxydation à basse température

Le mécanisme d'oxydation à basse température est amorcé par l'arrachement d'un atome d'hydrogène de l'alcane par une molécule d'oxygène pour former un radical alkyl et un radical hydroperoxyde (cf. réaction II-1). Cette réaction lente devient rapidement négligeable devant l'attaque des petits radicaux (X= OH, H, $HO_2$, O) sur le réactif initial (cf. réaction II-2). L'oxygène moléculaire va ensuite venir se greffer sur les radicaux alkyles nouvellement créés pour former des radicaux peroxyalkyles (cf. réaction II-3).

$$RH + O_2 \rightarrow R^{\bullet} + HOO^{\bullet} \qquad \text{(R II-1)}$$

$$RH + X^{\bullet} \rightarrow R^{\bullet} + XH \qquad \text{(R II-2)}$$

$$R^{\bullet} + O_2 \leftrightarrow ROO^{\bullet} \qquad \text{(R II-3)}$$

Les radicaux peroxyalkyles peuvent ensuite réagir selon plusieurs voies. Ils peuvent arracher l'hydrogène d'une molécule R'H pour former un hydroperoxyalkyle (cf. réaction II-

4) qui se décomposera par la suite en radicaux alkoxy et hydroxyle (cf. réaction II-5). Ils peuvent subir une réaction de dismutation avec un autre radical peroxyalkyle pour former deux radicaux alkoxy et de l'oxygène (cf. réaction II-6). Ils peuvent également s'isomériser via un état de transition cyclique formant un radical hydroperoxyalkyle (cf. réaction II-7).

$$ROO^{\bullet} + R'H \leftrightarrow {}^{\bullet}R' + RO_2H \qquad \text{(R II-4)}$$

$$RO_2H \rightarrow RO^{\bullet} + {}^{\bullet}OH \qquad \text{(R II-5)}$$

$$ROO^{\bullet} + R'OO^{\bullet} \rightarrow RO^{\bullet} + R'O^{\bullet} + O_2 \qquad \text{(R II-6)}$$

$$ROO^{\bullet} \leftrightarrow {}^{\bullet}QO_2H \qquad \text{(R II-7)}$$

Le radical hydroperoxyalkyle ($QO_2H$) va à son tour réagir de diverses manières. Il peut se décomposer et former soit un radical hydroperoxyde et une oléfine, soit un radical hydroxyle et différents produits oxygénés selon les liaisons rompues : éthers cycliques ou composés carbonylés. Cependant, une des voies réactionnelles les plus importantes est la fixation d'une molécule d'oxygène par $QO_2H$ pour former un radical hydroperoxyperoxyalkyle (cf. réaction II-8) qui va à son tour s'isomériser pour former un cétohydroperoxyde et un radical hydroxyle (cf. réaction II-9). Les cétohydroperoxydes étant instables au delà de 600 K, ils vont rapidement se dégrader et émettre un nouveau radical hydroxyle (cf. réaction II-10).

$${}^{\bullet}QO_2H + O_2 \rightarrow {}^{\bullet}OOQO_2H \qquad \text{(R II-8)}$$

$${}^{\bullet}OOQO_2H \rightarrow OUO_2H + {}^{\bullet}OH \qquad \text{(R II-9)}$$

$$OUO_2H \rightarrow OUO^{\bullet} + {}^{\bullet}OH \qquad \text{(R II-10)}$$

La production importante de radicaux hydroxyles lors des étapes II-9 et II-10 va entraîner une rapide augmentation de la réactivité. En effet, les radicaux produits lors de ce branchement dégénéré vont réagir par métathèse sur le réactif (cf. réaction II-2) ce qui peut conduire à une réaction en chaîne et à une augmentation exponentiel du nombre de radicaux. Ce phénomène correspond à la flamme froide visible sur la figure II-2.

## 3.2 Coefficient négatif de température

La transition entre la cinétique d'oxydation de basse température et la cinétique d'oxydation de haute température se traduit dans un premier temps par une diminution de la réactivité. La plage de température où ce phénomène est observé est appelée zone de coefficient négatif de température. Cette chute de réactivité a plusieurs raisons : dans un premier temps, l'augmentation de température provoque un ralentissement des vitesses de réaction de ramification et favorise la mise en place d'un mécanisme en chaînes droites. De plus, dans cette gamme de température, l'oxydation des radicaux alkyles (cf. réaction II-11) devient importante par rapport à l'addition d'oxygène (cf. réaction II-3) qui est thermodynamiquement défavorisée. Ces deux phénomènes aboutissent à une forte diminution

de la formation des radicaux hydroxyles et du taux de ramification en faveur de la formation d'hydroperoxyde ($HO_2$). Ce dernier est considérablement moins réactif que OH et va principalement réagir par dismutation pour former du peroxyde d'hydrogène, inerte à cette température, qui va s'accumuler (cf. réaction II-12) ce qui explique la chute brutale de réactivité [100].

$$R^{\bullet} + O_2 \rightarrow alcène + HOO^{\bullet} \quad \text{(R II-11)}$$

$$HOO^{\bullet} + HOO^{\bullet} \rightarrow H_2O_2 + O_2 \quad \text{(R II-12)}$$

## 3.3 Mécanisme d'oxydation a haute température

Au delà de 800 K, la température est suffisamment élevée pour que la décomposition par β-scission des radicaux alkyle devienne plus rapide que l'addition d'oxygène moléculaire par la réaction II-3. Cette décomposition peut se faire par rupture C-C pour former un alcène et un radical alkyle de taille inférieure (cf. réaction II-13) ou bien par rupture C-H pour former un alcène et un atome d'hydrogène (cf. réaction II-14). Les alcènes et radicaux formés vont à leur tour subir ce mécanisme de dégradation et d'oxydation jusqu'à la formation de dioxyde de carbone [101]. Dans ce domaine de température, les réactions associées au système $H_2/O_2$ sont prépondérantes et responsables de l'emballement de la réaction. D'une part, la température est suffisamment élevée pour permettre la dissociation de $H_2O_2$ en deux radicaux hydroxyles (cf. réaction II-15). D'autre part, la réaction de consommation des radicaux $H^{\bullet}$ par la voie II-16 prend le pas sur la réaction II-12. La production importante de radicaux $^{\bullet}OH$ qui en résulte augmente la réactivité et permet la mise en place du mécanisme d'oxydation à haute température [100].

$$R^{\bullet} \rightarrow {}^{\bullet}R' + alcène \quad \text{(R II-13)}$$

$$R^{\bullet} \rightarrow H^{\bullet} + alcène \quad \text{(R II-14)}$$

$$H_2O_2 + M \rightarrow {}^{\bullet}OH + {}^{\bullet}OH + M \quad \text{(R II-15)}$$

$$H^{\bullet} + O_2 \rightarrow {}^{\bullet}OH + O^{\bullet\bullet} \quad \text{(R II-16)}$$

Les processus d'oxydation des hydrocarbures diffèrent donc grandement en fonction du domaine de température étudié [98,103]. La Figure II-3 synthétise les différents mécanismes mis en œuvre dans les séquences d'amorçage et de propagation de l'oxydation des hydrocarbures (avec ui = réaction unimoléculaire, bi = réaction biomoléculaire, bs = β-scission, me = métathèse, ox = oxydation, co = combinaison, is = isomérisation, adox = addition d'oxygène, dis = dismutation et or = formation d'un cycle oxygéné).

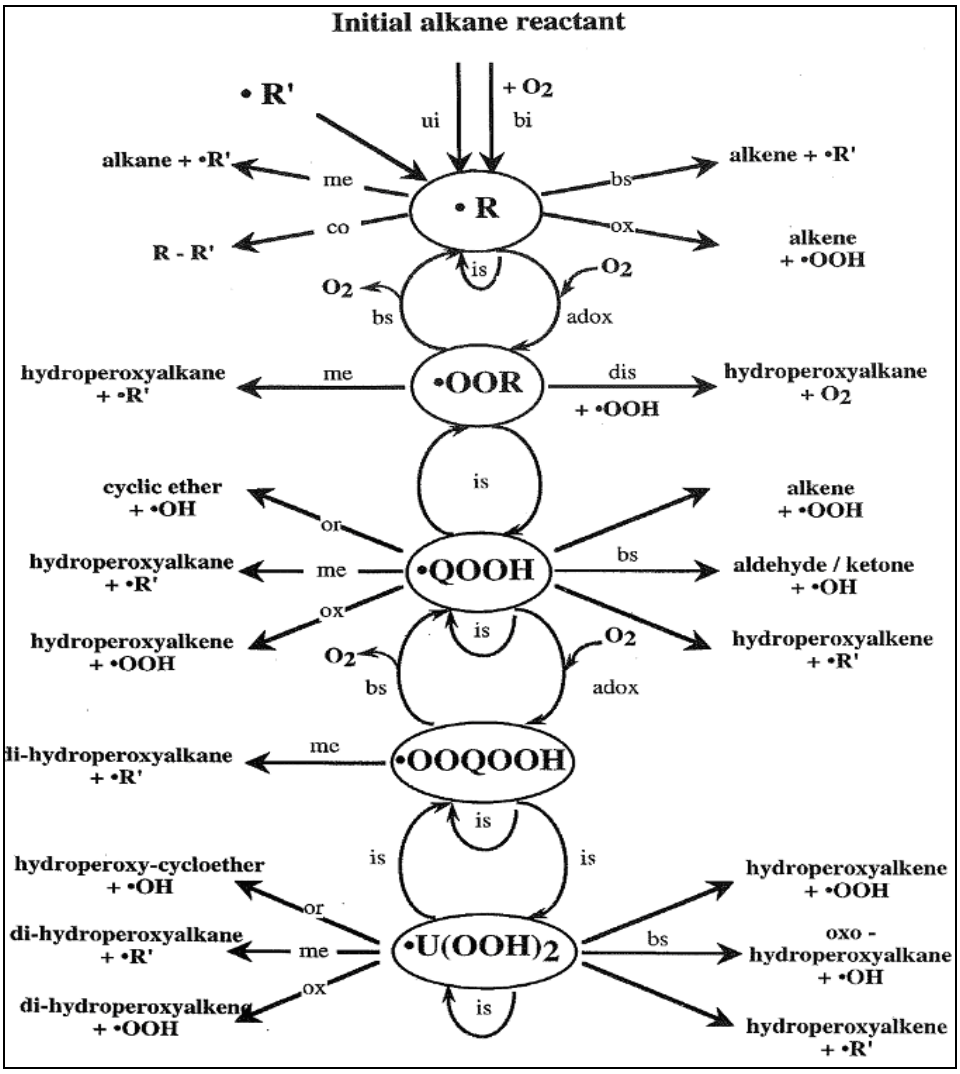



Figure II-3 : Principales voies d'oxydation des alcanes [104]

# 4. État de l'art sur l'oxydation des esters méthyliques

La prise de conscience collective de l'épuisement des ressources fossiles et l'émergence des biocarburants ont relancé l'intérêt des études cinétiques sur l'oxydation des carburants oxygénés [105]. Bien que la majorité des travaux effectuées à ce jour aient porté sur les alcanes, la plupart des auteurs considèrent que l'oxydation des esters méthyliques à longue chaîne est très proche de celle des paraffines de taille équivalente [107-108]. Les esters méthyliques constituants l'EMAG sont donc soumis à un schéma réactionnel proche de celui décrit dans la section précédente. Néanmoins, la présence de la fonction ester en bout de chaîne induit quelques spécificités. Notamment, la combustion de l'EMAG engendre la formation de CO et de $CO_2$ à basse température. Afin de comprendre ce phénomène, Osmont et al. [106,107] ont évalué les énergies des liaisons C-H, C-C et C-O pour plusieurs esters méthyliques de grandes tailles à l'aide de méthodes quantiques. Leurs travaux révèlent que la rupture des liaisons C-O de la fonction ester est énergétiquement défavorisée par rapport aux ruptures C-C. Cette observation pourrait expliquer la formation importante de $CO_2$ et de CO à

basse température lors de la combustion de l'EMAG. Une publication récente synthétise la plupart des études menées sur la cinétique chimique de combustion des esters méthyliques [108].

Le premier mécanisme d'oxydation des esters méthyliques a été publié par Fisher et al. [109] en 2000. Il porte sur le butanoate de méthyle ($C_5H_{10}O_2$) et comporte 279 espèces et 1259 réactions. Ce composé est beaucoup plus petit que les esters constituants l'EMAG traditionnel (de l'ordre de $C_{12}$ à $C_{18}$) mais il permet une première approche afin de bien comprendre l'impact de la fonction ester sur la réactivité. Le modèle en lui-même s'appuie en grande partie sur les règles d'oxydation des alcanes développées par Curran et al. [110] lors de leur étude sur le n-heptane. La présence du groupement ester induit néanmoins quelques spécificités. La différence la plus notable est certainement la faible énergie de liaison C-H du carbone situé en α de la fonction carbonyle. Fisher et al. [109] ont estimé que cette énergie de liaison était équivalente à celle d'une liaison C-H tertiaire. Le carbone adjacent à la fonction carbonyle sera donc la cible privilégiée pour l'arrachage d'un atome d'hydrogène. A l'époque, le manque de données expérimentales sur ce type de composé n'avait pas permis la validation du mécanisme sur une gamme étendue de mesures. Notamment, les prédictions du modèle surestimaient les vitesses de réactions du butanoate de méthyle par un facteur 10 par rapport à celles obtenues en réacteur statique. Cette première étude a démontré un besoin important en données expérimentales afin d'améliorer les futurs mécanismes.

En 2007, Gail et al. [111] ont amélioré le modèle initial et l'ont validé en simulant des points expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité, en flamme de diffusion à contre-courants et en réacteur à écoulement. En reprenant les constantes de vitesses des réactions d'abstraction d'hydrogène du butanoate de méthyle et en modifiant les réactions de formation du formaldéhyde cette équipe a réussie à mieux reproduire les profils d'espèce obtenus en JSR. La même année, Metcalfe et al. [112] ont mesuré les délais d'auto-inflammation du butanoate de méthyle en tube à choc. Ils ont également développé un modèle cinétique détaillé reproduisant de manière satisfaisante leurs points expérimentaux. Ce nouveau mécanisme est basé sur celui de Fisher et al. [109] mais contient quelques améliorations : le bloc $H_2/O_2$ a été remplacé et une voie de décomposition du butanoate de méthyle passant par un cycle transitionnel à 6 membres, suggérée par El-Nahas et al. [113] lors d'une étude préalable, a été rajoutée. L'année suivante, Dooley et al. [114] ont amélioré ce schéma cinétique en remaniant les constantes de vitesse des réactions de décompositions unimoléculaire. Notamment, la modification des données cinétiques de décomposition du radical methoxy formyl ($CH_3OCO$), a permis de mieux reproduire la formation précoce de CO et $CO_2$ lors de la combustion du butanoate de méthyle. Les prédictions de ce nouveau modèle sont en accord avec les délais d'auto-inflammation obtenus en tube à choc et en machine à compression rapide. Toujours en 2008, Huynh et al. [115] ont déterminé, à l'aide de calculs ab initio, 13 voies de décomposition thermique du butanoate de méthyle. Ce sous-

mécanisme a été intégré au modèle de Fisher et al. [109] et a permis une meilleure prédiction des délais d'auto-inflammations obtenus par Dooley et al. [114] et des profils expérimentaux de $CO_2$ de Farooq et al. [116].

L'EMAG étant constitué d'une multitude d'esters plus ou moins insaturés, il semble important de comprendre l'effet de l'insaturation des réactifs sur la combustion. Partant de ce constat, de nombreuses études se sont intéressées à l'oxydation des esters insaturés. Sarathy et al. [117] ont comparé l'oxydation du butanoate de méthyle et du 2-butenoate de méthyle (ou crotonate de méthyle: ester méthylique insaturé $C_5H_8O_2$) en réacteur auto-agité pour voir l'impact d'une double liaison sur la réactivité. Un mécanisme d'oxydation du crotonate de méthyle a alors été mis au point par Gail et al. [118] et validé dans un large domaine expérimental. D'après ces deux études, la présence de la double liaison n'affecte pas la réactivité de l'ester mais augmente la quantité d'espèces insaturées émises lors de l'oxydation. Récemment, Bennadji et al. [119] ont étudié les délais d'auto-inflammation de plusieurs esters méthyliques saturés et insaturés en tube à choc. Contrairement aux deux études précédentes, les résultats de Bennadji et al. [119] semblent montrer une diminution de la réactivité due à la présence de la double liaison. D'après Zhang et al. [120], la rigidité d'une double liaison défavorise la formation de cycles à 6 membres lors de l'oxydation de l'ester. La décomposition de ces cycles transitionnels étant une voie réactionnelle importante à basse température, on peut aisément comprendre que la présence d'une insaturation entraîne une baisse de la réactivité.

Plusieurs études se sont également intéressées à l'impact de la structure moléculaire de l'ester sur la réactivité. Metcalfe et al. [112] ont comparé la combustion du butanoate de méthyle et du propanoate d'éthyle (ester éthylique isomère du butanoate de méthyle) en tube à choc et en réacteur auto-agité. Un schéma cinétique d'oxydation de cet ester éthylique a été mis au point par analogie avec le mécanisme du butanoate de méthyle. Les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité et tube à choc montrent une vitesse de réaction légèrement plus élevée pour les esters éthyliques. Les résultats obtenus par Walton et al. [121] en machine à compression rapide semblent corroborer cette théorie. D'après Metcalfe et al. [112], ce phénomène peut s'expliquer par la mise en place de voies réactionnelles différentes lors de la décomposition de ces deux isomères. Le propanoate d'éthyle va préférentiellement se décomposer en éthylène et en acide propanoïque via un cycle transitionnel à 6 membres. De son coté, le butanoate de méthyle va transiter via un cycle à 6 membres pour former de l'éthylène et de l'éthanoate de méthyle. La réactivité plus élevée de l'acide propanoïque par rapport à l'éthanoate de méthyle pourrait expliquer la plus grande vitesse d'oxydation du propanoate d'éthyle. En 2009, Hakka et al. [122] ont étudié l'auto-inflammation du butanoate d'éthyle et de méthyl en tube à choc. Ils arrivent aux mêmes conclusions que les études précédentes.et leurs résultats expérimentaux sont correctement simulés par leur mécanisme cinétique généré automatiquement par le logiciel EXGAS.

Ni Gail et al. [111] , ni Dooley et al. [114] n'ont observé de réactivité à basse température lors de leurs expériences. En effet, la chaîne carbonée du butanoate de méthyle n'est pas suffisamment longue pour engendrer une flamme froide. Ils en ont donc conclu que cette molécule n'était pas idéale pour simuler le comportement cinétique de l'EMAG et qu'il fallait s'orienter vers des composés de plus grande taille.

Dayma et al. ont successivement mis au point un modèle cinétique d'oxydation de l'hexanoate de méthyle [123] et de l'heptanoate de méthyle [124] et les ont validés en simulant des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité. Une flamme froide a bien été observée lors des deux études, ce qui montre que les esters possédant une chaîne carbonée avec 6 atomes de carbone ou plus sont acceptables pour représenter le comportement cinétique de l'EMAG. En 2009, Togbé et al. [125] ont développé un mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle à partir des modèles antérieurs de Dayma et al. [123,124] et ont reproduit de manière correcte les données expérimentales pour la combustion de mélanges éthanol/octanoate de méthyle en réacteur auto-agité.

Herbinet et al. [126] ont mis au point un mécanisme d'oxydation du décanoate de méthyle ($C_{11}H_{22}O_2$) qui a été validé sur les rares données expérimentales disponibles. Ce modèle, mettant en jeu 3012 espèces et 8820 réactions, présente l'intérêt de bien reproduire la formation précoce de $CO_2$ à basse température (due à la décomposition de la fonction ester) observée expérimentalement par Dagaut et al. [127]. Seshradi et al. [128] ont alors réduit ce mécanisme cinétique pour simuler les limites d'extinction d'une flamme de décanoate de méthyle en bruleur à contre courant. Lors d'une étude ultérieure, Herbinet et al. [129] ont développé un modèle pour 5-decenoate de méthyle et le 9-decenoate de méthyle (2 isomères insaturés $C_{11}H_{20}O_2$) par analogie avec leur mécanisme du décanoate de méthyle. Leurs travaux ont permis de quantifier l'impact de la position de la double liaison sur la chaîne alkyl de l'ester. En effet, le 5-decenoate de méthyle semble moins réactif que le 9-decenoate de méthyle. Ce phénomène peut s'expliquer comme suit: les possibilités de formation de cycles à 6 ou 7 membres diminuent lorsque l'insaturation se déplace vers les positions centrales de la chaîne alkyle [120]. Plus récemment, Diévart et al. [130] ont repris le mécanisme d'Herbinet et al. [126] et l'ont validé sur une large gamme expérimentale. Pour ce nouveau modèle, la cinétique d'oxydation du décanoate de méthyle a été construite par analogie avec les petits esters méthyliques plutôt que par comparaison avec les alcanes linéaires.

Grana et al. [131,132] ont mis au point un mécanisme globalisé (lumped scheme) d'oxydation du décanoate de méthyle. Cette approche a permis de réduire drastiquement le nombre d'espèce tout en conservant de bonnes prédictions sur une large gamme expérimentale.

Glaude et al. [133] ont amélioré le logiciel EXGAS afin qu'il puisse générer automatiquement des schémas cinétiques d'oxydation des esters méthyliques. Ils ont alors pu

mettre au point des mécanismes thermocinétiques d'oxydation de l'hexanoate de méthyle, de l'heptanoate de méthyle et du décanoate de méthyle qui prédisent de manière assez satisfaisante les profils d'espèces obtenus par Dayma et al. [123,124] en réacteur auto-agité. Biet et al. [134] ont utilisé le même logiciel pour mettre au point un modèle cinétique d'oxydation des esters méthyliques de $C_9$ à $C_{17}$. Malheureusement, le manque de données expérimentales concernant les esters de grande taille n'a pas permis de valider ce mécanisme au delà de l'octanoate de méthyle.

Des études plus récentes ont porté sur des esters méthyliques d'une taille plus représentative des composés présents dans l'EMAG. En 2009, Hakka et al. [135] ont étudié l'oxydation d'un mélange de n-décane et de palmitate de méthyle ($C_{17}H_{34}O_2$) en réacteur auto-agité. Dans la même équipe, Bax et al. [136] ont étudié l'oxydation d'un mélange de n-décane et d'oléate de méthyle (ester insaturé du palmitate, $C_{19}H_{36}O_2$) dans des conditions similaires. La comparaison des 2 résultats expérimentaux  a montré que la présence d'une double liaison inhibe légèrement la réactivité à basse température et favorise la formation de diènes. Finalement, Herbinet et al.[137] ont généré un mécanisme cinétique d'oxydation des esters méthyliques .de 11 à 19 atomes de carbone à l'aide du logiciel EXGAS. Les prédictions de ce modèle sont en accord avec les résultats obtenus par Hakka et al. [135] en réacteur auto-agité.

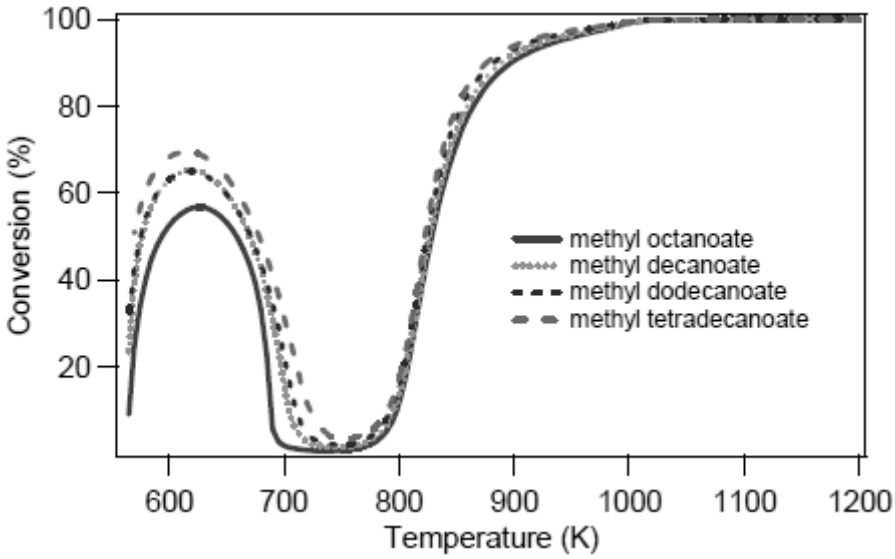



Figure II-4 : Réactivité des esters méthylique de 9 à 15 atomes de carbone[134]

De leur coté, Westbrook et al.[138] ont mis au point un mécanisme cinétique représentatif de l'oxydation de 5 espèces présentes dans les esters méthyliques d'huile de colza et de soja : stéarate de méthyle ($C_{19}H_{38}O_2$), oléate de méthyle ($C_{19}H_{36}O_2$), linoléate de méthyle ($C_{19}H_{34}O_2$), linolénate de méthyle ($C_{19}H_{32}O_2$) et palmitate de méthyle ($C_{17}H_{34}O_2$). Peu de données expérimentales existent pour ce type d'ester à longue chaine, le modèle à donc seulement pu être validé face aux résultats expérimentaux de Hakka et al. [135] et Bax et al. [135] en réacteur auto-agité. Ce schéma semble représentatif de la composition chimique

réelle d'un EMHV; néanmoins sa taille impressionnante (environ 4800 espèces et plus de 20000 réactions) le rend difficilement utilisable pour des calculs complexes.

La présence d'une fonction ester en bout de chaîne brise la symétrie de la molécule. Les mécanismes d'oxydation des esters méthyliques sont donc plus volumineux que ceux des n-alcanes pour un nombre de carbones équivalent puisqu'il faut prendre en compte un plus grand nombre de radicaux. Par exemple, le modèle généré par EXGAS pour l'octanoate de méthyle ($C_9H_{18}O_2$) comporte 668 espèces et 3905 réactions contre 423 espèces et 2709 réactions pour le n-nonane ($C_9H_{20}$). Cette différence de taille entre les mécanismes d'oxydation des alcanes et des esters devient de plus en plus importante à mesure que les molécules impliquées grandissent. De plus, la réactivité des esters méthyliques plus longs que l'octanoate de méthyle est quasiment identique sauf à faible température (cf. Figure II-4). En outre, plusieurs études récentes ont démontré que l'utilisation de n-alcanes à longues chaînes comme substitut pour l'EMAG donne des résultats satisfaisants en termes de réactivité.

Tableau II-4 : Mécanismes détaillés d'oxydation d'esters méthyliques saturés

| Formules | Références | Année | Nombre d'espèces | Nombre de réactions | Validation | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | Réacteur | T (K) | P (atm) | Φ |
| $C_5H_{10}O_2$ | Fisher et al.[109] | 2000 | 279 | 1259 | SR | 540-740 | 0,4 | 3,25 |
| | Metcalfe et al.[112] | 2007 | 139 | 786 | ST | 1100-1650 | 1; 4 | 0,3-1,5 |
| | Gail et al. [111] | 2008 | 301 | 1516 | JSR | 850-1400 | 1 | 0,4-1,1 |
| | | | | | CF | 298 | 1 | / |
| | Dooley et al.[114] | 2008 | 275 | 1545 | ST | 1250-1750 | 10-40 | 0,3-1,5 |
| | | | | | RCM | 650-950 | 10-40 | 0,3-1 |
| | Hakka et al.[122] | 2010 | 203 | 1317 | ST | 900-1650 | 1-10 | 0,4-1 |
| | | | | | JSR | 800-850 | 1 | 0,5-1 |
| $C_7H_{14}O_2$ | Dayma et al.[123] | 2008 | 435 | 1875 | JSR | 500-1000 | 10 | 0,5-1,5 |
| $C_8H_{16}O_2$ | Dayma et al.[124] | 2009 | 1087 | 4592 | JSR | 550-1150 | 10 | 0,6-2 |
| $C_9H_{18}O_2$ | Togbé et al.[125] | 2009 | 1087 | 4592 | JSR | 550-1150 | 10 | 0,5-2 |
| $C_{11}H_{22}O_2$ | Seshadri et al.[128] | 2009 | 125 | 713 | CF | 478 | 1 | / |
| | Glaude et al.[133] | 2010 | 1251 | 7171 | JSR | 500-1100 | 1 | 1 |
| | Diévart et al.[130] | 2012 | 2276 | 7086 | JSR | 500-1100 | 1 | 1 |
| | | | | | ST | 650-1350 | 8-16 | 0,1-1,5 |
| | | | | | CF | 403 | 1 | 0,7-1,5 |
| | Grana et al.[132] | 2012 | 350 | 10000 | JSR | 550-1150 | 1 | 1 |
| | | | | | ST | 650-1350 | 8-16 | 0,1-1,5 |
| | | | | | CF | 403 | 1 | 0,7-1,5 |
| $C_{17}H_{34}O_2$ | Herbinet et al. [137] | 2011 | 4442 | 30425 | JSR | 550-1150 | 1 | 1 |

Le Tableau II-4 recense la plupart des mécanismes cinétiques d'oxydation des esters méthyliques saturés trouvables dans la littérature. Il apparait clairement que la taille des modèles cinétiques d'oxydation des esters méthyliques augmente de manière importante Il paraît donc peu judicieux à l'heure actuelle d'augmenter démesurément la complexité des modèles cinétiques en utilisant des esters méthyliques de plus en plus longs pour simuler l'oxydation de l'EMAG alors même que le gain espéré en terme de prédictivité semble assez limité. Pour cette raison, nous avons décidé de représenter l'EMAG utilisé au cours de cette étude par deux composés distincts: l'octanoate de méthyle et le n-décane. L'octanoate de

méthyle permet de simuler l'impact de la fonction ester sur la combustion: notamment l'émission précoce de $CO_2$ et la formation de polluants spécifiques (esters insaturés, aldéhyde...). L'ajout de n-décane permet d'obtenir un substitut ayant une formule brute CxHyOz identique à celle de l'EMAG et de maintenir un rapport prédiction/temps de calcul satisfaisant.

# 5. État de l'art sur l'oxydation de l'éthanol

L'éthanol occupe une place de plus en plus importante parmi les carburants modernes. Il est donc important de bien comprendre les réactions chimiques gouvernant l'oxydation de ce composé afin de maîtriser les émissions polluantes de ce biocarburant (notamment les aldéhydes). Or, si l'oxydation de l'éthanol à haute température est aujourd'hui bien connue [139], il existe encore peu de données concernant la cinétique chimique de ce composé à basse température et dans le domaine de coefficient négatif de température .

L'oxydation de l'éthanol est initiée par l'arrachement d'un atome d'hydrogène primaire (cf. réaction II-17), secondaire (cf. réaction II-18) ou de la fonction alcool (cf. réaction II-19) par collision avec une espèce X (X = H, O, OH, $HO_2$, $CH_3$, $O_2$) pour former l'un des trois isomères $C_2H_5O^\bullet$.

$$CH_3CH_2OH + X^\bullet \rightarrow {}^\bullet CH_2CH_2OH + XH \qquad \text{(R II-17)}$$

$$CH_3CH_2OH + X^\bullet \rightarrow CH_3{}^\bullet CHOH + XH \qquad \text{(R II-18)}$$

$$CH_3CH_2OH + X^\bullet \rightarrow CH_3CH_2O^\bullet + XH \qquad \text{(R II-19)}$$

A basse température, le radical β-hydroxyéthyle va s'additionner sur une molécule d'oxygène pour former un radical hydroxyperoxyéthyle (cf. réaction II-20). Ce radical va préférentiellement s'isomériser via un état de transition cyclique à 6 membres (cf. réaction II-21). Ce nouveau radical va alors se décomposer en deux étapes pour former deux molécules de formaldéhyde et un radical hydroxyle (cf. réactions II-22 et II-23).

$${}^\bullet CH_2CH_2OH + O_2 \rightarrow {}^\bullet OOCH_2CH_2OH \qquad \text{(R II-20)}$$

$${}^\bullet OOCH_2CH_2OH \rightarrow HO_2CH_2CH_2O^\bullet \qquad \text{(R II-21)}$$

$$HO_2CH_2CH_2O^\bullet \rightarrow CH_2O + {}^\bullet CH_2O_2H \qquad \text{(R II-22)}$$

$${}^\bullet CH_2O_2H \rightarrow CH_2O + {}^\bullet OH \qquad \text{(R II-23)}$$

A basse température, le radical α-hydroxyéthyle va lui aussi s'additionner sur une molécule d'oxygène pour former un radical hydroxyperoxyéthyle (cf. réaction II-24). Ce radical va préférentiellement s'isomériser via un cycle à cinq membres (cf. réaction II-25). Le nouveau radical va rapidement se décomposer par β-scission pour former de l'acétaldéhyde et un hydroperoxyde (cf. réaction II-26).

$$CH_3{}^{\bullet}CHOH + O_2 \rightarrow CH_3CH(OO^{\bullet})OH \qquad \text{(R II-24)}$$

$$CH_3CH(OO^{\bullet})OH \rightarrow CH_3CH(O_2H)O^{\bullet} \qquad \text{(R II-25)}$$

$$CH_3CH(O_2H)O^{\bullet} \rightarrow CH_3CHO + HOO^{\bullet} \qquad \text{(R II-26)}$$

A mesure que la température augmente, l'influence des radicaux éthoxy sur la réactivité devient plus grande. Ils vont principalement se décomposer par β-scission pour former du formaldéhyde et un radical méthyle (cf. réaction II-27) ou de l'acétaldéhyde et un atome d'hydrogène (cf. réaction II-28).

$$CH_3CH_2O^{\bullet} \rightarrow {}^{\bullet}CH_3 + CH_2O \qquad \text{(R II-27)}$$

$$CH_3CH_2O^{\bullet} \rightarrow CH_3CHO + H^{\bullet} \qquad \text{(R II-28)}$$

Au final, on voit bien que les produits majoritairement formés lors de l'oxydation de l'éthanol sont le formaldéhyde et l'acétaldéhyde. La Figure II-5 synthétise les principales voies réactionnelles mises en jeu lors de l'oxydation de l'éthanol en flamme laminaire de pré-mélange.

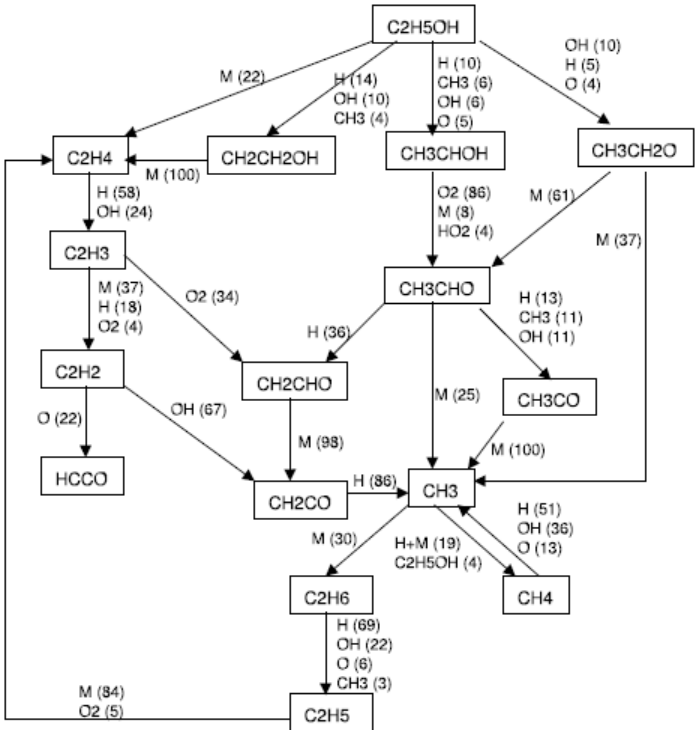



Figure II-5 : Voies réactionnelles d'une flamme laminaire d'éthanol pré-mélangé [140]

# 6. Démarche globale de modélisation

La Figure II-6 synthétise la démarche globale de modélisation mise en place lors de ce travail de thèse. Dans un premier temps, quatre espèces modèles ont été choisies de manière à représenter de manière correcte le comportement des mélanges F-T/EMAG/éthanol lors de la combustion. Ensuite, les mécanismes cinétiques choisis pour chacune de ces espèces seront

validés et optimisés par comparaison avec des données expérimentales disponibles dans la littérature. Les quatre schémas cinétiques seront alors couplés afin de générer le mécanisme quaternaire utilisé pour la suite de ce travail de thèse. Les prédictions de ce mécanisme seront comparées à nos résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité lors de l'oxydation de mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol à diverses richesses. Enfin, le modèle pourra réduit ou tabulé en vue d'un couplage avec un code CFD pour simuler nos résultats expérimentaux obtenus sur banc moteur.

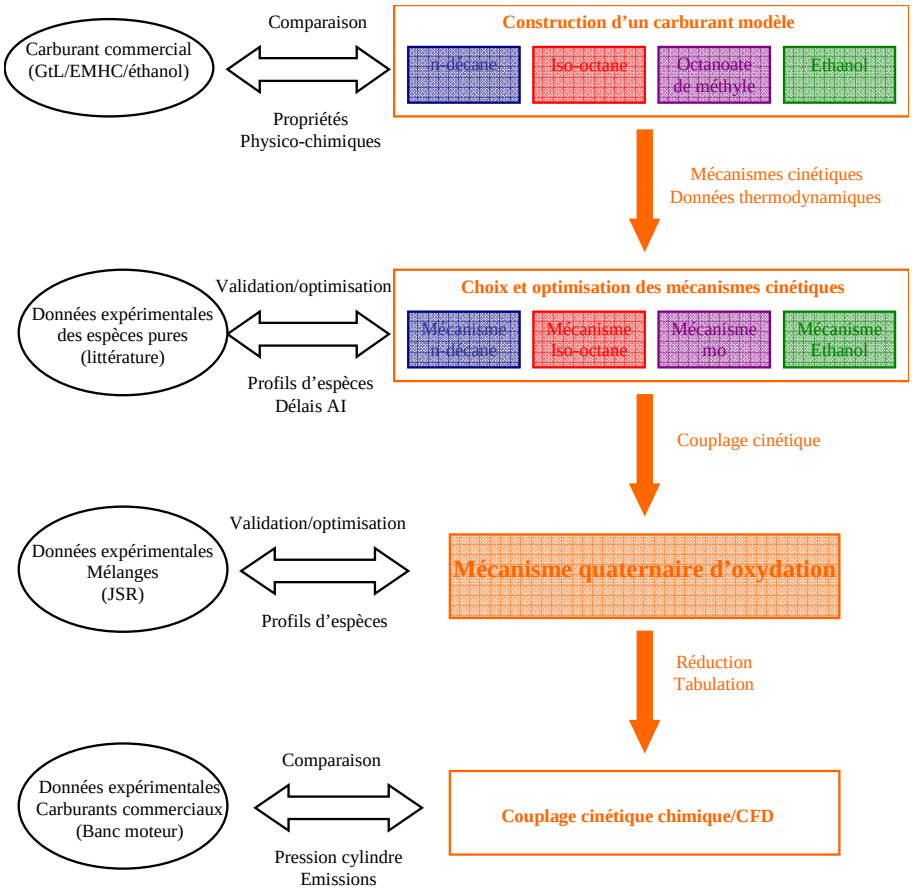



Figure II-6 : Méthodologie de mise au point et validation d'un mécanisme quaternaire d'oxydation

# 7. Conclusion

Dans le cadre d'une modélisation cinétique de la combustion d'un carburant complexe, il n'est pas toujours possible de prendre en compte toutes les espèces chimiques présentes dans le carburant. Des choix de modélisation s'avèrent nécessaires afin d'optimiser le temps de calcul. Dans ce chapitre nous avons pu isoler 4 espèces chimiques susceptibles de représenter convenablement les propriétés physico-chimiques des mélanges F-T/EMAG/éthanol. Les

quatre espèces choisies sont le n-décane, l'iso-octane, l'octanoate de méthyle et l'éthanol. Tous ces composés ont déjà fait l'objet d'études expérimentales et numériques.

Ce chapitre présente également un état de l’art sur la cinétique d’oxydation de ces composés et explique la démarche globale de modélisation entreprise durant ce travail de thèse. Dans le chapitre suivant nous décrirons en détail la mise au point et la validation du mécanisme quaternaire d’oxydation développé à partir de ces espèces modèles.

# Chapitre III
# Développement et validation du mécanisme cinétique

# 1. Introduction

L'étude bibliographique développée dans le chapitre précédent nous a permis de sélectionner 4 espèces modèles permettant de simuler la cinétique chimique d'oxydation des mélanges F-T/RME/éthanol : le n-décane, l'iso-octane, l'octanoate de méthyle et l'éthanol.

Dans ce chapitre nous nous intéressons au développement et à la validation du modèle quaternaire d'oxydation de ces composés. Nous décrirons le choix de chacun des sous-mécanismes utilisés, les modifications majeures apportées aux schémas initiaux et leurs impacts sur les prédictions cinétiques. Enfin, nous expliquerons, la méthode de couplage utilisée pour obtenir le mécanisme réactionnel utilisé au cours de cette thèse.

# 2. Base C0-C4

## 2.1 Choix du sous-mécanisme initial

Les réactions mises en jeu lors de l'oxydation d'un hydrocarbure peuvent être classées selon 2 catégories. D'une part, les réactions spécifiques au réactif initial, décrivant la décomposition des espèces lourdes pour former des composés de plus en plus légers. Et d'autre part, les réactions communes à tous les hydrocarbures dans lesquels interviennent des espèces de faible taille (0 à 4 atomes de carbone). Ainsi, la base C0-C4 peut être considérée comme le noyau commun faisant le lien entre les différents sous-mécanismes du modèle quaternaire. Cette base commune a une forte influence sur la cinétique d'oxydation globale du mécanisme et doit donc être choisie avec soin.

Parmi les modèles disponibles dans la littérature on peut citer le mécanisme de Konnov [141], celui de Leeds [142] ou le modèle GRI 3.0 [143]. Dans cette étude, nous nous sommes basés sur le modèle développé par Le Cong en 2007 [144]. En effet, cette base C0-C4 a fait l'objet de nombreuses validations et donne des résultats très satisfaisants en réacteur auto-agité.

## 2.2 Modifications apportées

Certaines réactions pseudo bi-moléculaires ou unimoléculaires de la base C0-C4 de Le Cong [144] étaient déclarées plusieurs fois, à une pression données (1, 10 ou 100 atm). Il existait donc trois "blocs de pression" qui devaient être substitués en fonction des conditions expérimentales simulés. Afin de rendre le nouveau modèle plus souple et utilisable à toute pression, ces réactions ont été ré-exprimées selon un formalisme Troe. Les nouvelles constantes de vitesses adoptées ont été déterminées par une méthode des moindres carrés. Ces modifications sont présentées dans le Tableau III-1.

Tableau III-1 : Constantes de vitesse modifiées dans le mécanisme de l'octanoate de méthyle

| Réactions | Constantes de vitesses initiales* | | | | Constantes de vitesses de ce travail* | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | P | A | n | Ea | K | A | n | Ea |
| c2h3+o2=ch2hco+o | 1 atm | $1,447E^{+05}$ | -0,78 | 3135 | $K_{inf}$ | $1,000E^{+13}$ | -0,24 | -564,1 |
| | 10 atm | $1,176E^{+17}$ | -1.36 | 5580 | $K_0$ | $5,000E^{+12}$ | -0,04 | 54,6 |
| | 100 atm | $5.270E^{+21}$ | -2,44 | 11329 | Troe | $0,5/1/1/2,8E^{+03}$ | | |
| c2h3+o2=ch2o+hco | 1 atm | $1,853E^{+23}$ | -3,29 | 3892 | $K_{inf}$ | $1,010E^{+28}$ | -2,50 | 12197 |
| | 10 atm | $9,275E^{+25}$ | -3,96 | 7043 | $K_0$ | $1,853E^{+23}$ | -3,25 | 3892 |
| | 100 atm | $1,010E^{+28}$ | -4,54 | 12197 | Troe | $1,333E^{-03}/1/1,0E^{+04}/5,0E^{+03}$ | | |
| c2h3+o2=chocho+h | 1 atm | $1,910E^{+18}$ | -2,25 | 2398 | $K_{inf}$ | $8,900E^{+23}$ | -1,14 | 11452 |
| | 10 atm | $7,780E^{+20}$ | -2,94 | 5541 | $K_0$ | $1,910E^{+18}$ | -2,27 | 1577,0 |
| | 100 atm | $8,900E^{+23}$ | -2,44 | 11329 | Troe | $2,862E^{-04}/1/1E^{+04}/4,162E^{+03}$ | | |
| c2h3+o2=c2h2+ho2 | 1 atm | $5,190E^{+15}$ | -1,26 | 3310 | $K_{inf}$ | $3,610E^{+27}$ | -0,52 | 16383 |
| | 10 atm | $3,250E^{+19}$ | -2,26 | 7932 | $K_0$ | $5,190E^{+15}$ | -1,28 | 3310,3 |
| | 100 atm | $3.610E^{+23}$ | -3,26 | 16383 | Troe | $9,927E^{-07}/1/1E^{+04}/5E^{+03}$ | | |
| c2h5+o2=c2h4+ho2 | 1 atm | $3,000E^{+20}$ | -2,86 | 6761 | $K_{inf}$ | $1,000E^{+30}$ | -1,96 | 15860 |
| | 10 atm | $1,010E^{+31}$ | -5,81 | 15860 | $K_0$ | $2,560E^{+19}$ | -2,73 | 1978,0 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $6,337E^{-06}/1/1E^{+04}/5E^{+03}$ | | |
| c2h5+o2=ch3hco+oh | 1 atm | $1,600E^{+14}$ | -1,17 | 10391 | $K_{inf}$ | $6,930E^{+17}$ | -1,94 | 14020 |
| | 10 atm | $6,930E^{+17}$ | -2,17 | 14020 | $K_0$ | $4,550E^{+13}$ | -0,93 | 9665,0 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $2,095E^{-02}/1/1E^{+04}/5E^{+03}$ | | |
| ch3+oh=ch2oh+h | 1 atm | $2,640E^{+19}$ | -1,80 | 8068 | $K_{inf}$ | $1,990E^{+21}$ | -0,83 | 11157 |
| | 10 atm | $1,990E^{+19}$ | -1,68 | 11157 | $K_0$ | $3,500E^{+14}$ | -0,42 | 2978 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $1,024E^{-03}/1/1E^{+04}/5E^{+03}$ | | |
| ch3+oh=ch3o+h | 1 atm | $5,740E^{+12}$ | -0,23 | 8068 | $K_{inf}$ | $9,950E^{+14}$ | -0,80 | 16872 |
| | 10 atm | $9,950E^{+14}$ | -0,82 | 16872 | $K_0$ | $9,160E^{+11}$ | -0,01 | 13083 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $0/1/1,009E^{+04}/1,186E^{+03}$ | | |
| ch3+oh=sch2+h2o | 1 atm | $7,200E^{+13}$ | 0,00 | 2780 | $K_{inf}$ | $6,370E^{+20}$ | -0,06 | 11141 |
| | 10 atm | $6,370E^{+18}$ | -1,67 | 11141 | $K_0$ | $1,380E^{+14}$ | -0,50 | 1965,0 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $1,291E^{-04}/1/1E^{+04}/5E^{+03}$ | | |
| ch3+oh=ch2o+h2 | 1 atm | $3,190E^{+12}$ | -0,53 | 10810 | $K_{inf}$ | $7,390E^{+17}$ | -0,72 | 14551 |
| | 10 atm | $7,390E^{+14}$ | -1,13 | 14551 | $K_0$ | $2,170E^{+10}$ | 0,13 | 8786 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $1,612E^{-03}/1/1E^{+04}/5E^{+03}$ | | |
| c3h3+c3h3=c6h5+h | 1 atm | $1,697E^{+48}$ | -9,98 | 36755 | $K_{inf}$ | $3,671E^{+26}$ | -3,88 | 28960 |
| | 10 atm | $3,671E^{+26}$ | -3,88 | 28960 | $K_0$ | $1,697E^{+48}$ | -9.98 | 36755 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $2,44E^{-02}/1/9,99E^{+03}/5,01E^{+03}$ | | |
| nc4h5+c2h2=c6h6+h | 1 atm | $7,829E^{+15}$ | -1,00 | 8901 | $K_{inf}$ | $1,650E^{+16}$ | -1,01 | 9480 |
| | 10 atm | $1,690E^{+16}$ | -1,03 | 8968 | $K_0$ | $7,829E^{+15}$ | -0,95 | 9033.9 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $1/1/1,0E^{+04}/5,0E^{+03}$ | | |
| nc4h5+c2h2=fulvene+h | 1 atm | $4,625E^{+15}$ | -0,89 | 9143 | $K_{inf}$ | $1,234E^{+22}$ | -1,80 | 16152 |
| | 10 atm | $1,740E^{+19}$ | -1,86 | 12384 | $K_0$ | $4,625E^{+15}$ | -0,93 | 9151,3 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $2,44E^{-02}/1/9,99E^{+03}/5,01E^{+03}$ | | |
| ic4h5+c2h2=c6h6+h | 1 atm | $1,668E^{+23}$ | -3,30 | 24961 | $K_{inf}$ | $1,000E^{+30}$ | -4,10 | 27360 |
| | 10 atm | $8,250E^{+24}$ | -3,76 | 26565 | $K_0$ | $1,668E^{+23}$ | -3,39 | 21022 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $4,40E^{-07}/1/9,91E^{+03}/4,67E^{+03}$ | | |
| ic4h5+c2h2=fulvene+h | 1 atm | $6,805E^{+24}$ | -3,45 | 20339 | $K_{inf}$ | $1,000E^{+34}$ | -2,16 | 39597 |
| | 10 atm | $9,738E^{+26}$ | -3.76 | 21329 | $K_0$ | $6,805E^{+24}$ | -3,45 | 20339 |
| | 100 atm | / | / | / | Troe | $4,803E^{-06}/1/1,0E^{+04}/5,0E^{+03}$ | | |

* constantes de vitesses de la forme ($k=AT^n\exp(-Ea/RT)$ ; unités : en $cm^3$, mol, s et cal.

# 3. Sous-mécanisme d'oxydation du n-décane

## 3.1 Choix du sous-mécanisme initial

Les alcanes linéaires représentent, de loin, l'espèce chimique ayant fait l'objet du plus grand nombre d'études cinétiques [103,106]. Le n-décane ne déroge pas à cette règle. Malgré le nombre important de réactions et de sous produits mis en jeux lors de son oxydation, sa réactivité est aujourd'hui relativement bien connue. Le Tableau III-2 présente une sélection de modèles cinétiques d'oxydation du n-décane trouvés dans la littérature.

Tableau III-2 : Mécanismes détaillés d'oxydation du n-décane

| Références | Année | Nombre d'espèces | Nombre de réactions | Validation | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Réacteur | T (K) | P (atm) | Φ |
| Delfau et al.[145] | 1990 | 43 | 221 | FFB[a] | 473 | 0,06 | 1,9 |
| Dagaut et al. [146] | 1994 | 90 | 573 | JSR[b] | 850-1150 | 10 | 0,1-1,5 |
| Nehse et al. [147] | 1996 | 350 | 1650 | ST[c] | 700-1250 | 13 | 1-2 |
| Douté et al. [148] | 1997 | 78 | 638 | FF[a] | 473 | 1 | 1,7 |
| Glaude et al.[149] | 1998 | 1216 | 7920 | JSR[b] | 920-1030 | 1 | 0,2-1,5 |
| Zeppieri et al. [150] | 2000 | 52 | 407 | JSR[b] | 920-1030 | 1 | 1 |
| | | | | ST[a] | 1000-1300 | 13 | 1-2 |
| | | | | FR[d] | 1019-1040 | 1 | 1 |
| Lindsted et al. [151] | 2000 | 193 | 1085 | FF[a] | 473 | 0,06-1 | 1,7-1,9 |
| Battin-Leclerc et al. [152] | 2000 | 1216 | 7920 | JSR[b] | 550-1150 | 10 | 1 |
| | | | | FF[a] | 473 | 0,06 | 1,9 |
| Bikas et Peters [153] | 2001 | 67 | 600 | JSR[b] | 750-1100 | 10 | 1 |
| | | | | ST[c] | 700-1250 | 12-50 | 1-2 |
| | | | | FF[a] | 473 | 1 | 1,7 |
| Zhao et al. [154] | 2005 | 53 | 410 | ST[c] | 1000-1300 | 13 | 0,5-2 |
| | | | | FR[d] | 1019-1060 | 1 | 1 |
| | | | | FF[a] | 500 | 1 | 1,7 |
| Ranzi et al. [155] | 2005 | 250 | 5000 | JSR[b] | 550-1150 | 10 | 0,5-1,5 |
| | | | | ST[c] | 700-1300 | 13-50 | 0,5-2 |
| | | | | FR[d] | 1060 | 1 | 1 |
| | | | | FF[a] | 473 | 0,06-1 | 1,9 |
| Buda et al. [156] | 2005 | 715 | 3872 | ST[c] | 650-1200 | 12; 50 | 1 |
| Olchanski et al [157] | 2006 | 69 | 433 | ST[c] | 1200-1600 | 2-10 | 0,7-3 |
| Moréac et al. [158] | 2006 | 506 | 3684 | ST[c] | 700-1250 | 13-50 | 0,5-2 |
| Diévart [159] | 2008 | 884 | 3722 | JSR[b] | 550-1050 | 10 | 0,25-1,5 |
| | | | | ST[c] | 1400-1800 | 2,2 | 1 |
| | | | | FR[d] | 1019-1060 | 1 | 1 |
| Biet et al. [160] | 2008 | 715 | 3872 | JSR[b] | 550-1100 | 1-10 | 1 |
| | | | | ST[c] | 650-1200 | 12-80 | 1 |
| Westbrook et al. [161] | 2009 | 940 | 3878 | JSR[b] | 550-1150 | 10 | 1 |
| | | | | ST[c] | 700-1800 | 1,8-50 | 0,5-3 |
| | | | | FR[d] | 1019-1060 | 1 | 1 |
| | | | | RCM[e] | 630-700 | 7-30 | 0,8 |

[a]brûleur à flamme plate
[b]réacteur auto-agité
[c]tube à choc
[d]réacteur à écoulement
[e]machine à compression rapide

L'un des premiers modèles cinétiques détaillés d'oxydation du n-décane a été développé par Delfau et al. [145] en 1990. Ce mécanisme mettant en jeu 43 espèces et 221 réactions a été validé sur le domaine de haute température en simulant les profils de concentration d'une flamme riche de décane. Ce modèle a ensuite été amélioré par Douté et al. [148] afin de tenir compte de tous les isomères du radical décyle pouvant se former lors de la combustion. Les prédictions de cette nouvelle version sont en accord avec les profils d'espèces mesurés pour une flamme prémélangée décane/$O_2$/Ar.

En 1994, Dagaut et al. [146] ont simulé leurs résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité entre 550 et 1150 K. Si le mécanisme s'avère prédictif à haute température, il sous-estime néanmoins la réactivité en dessous de 800 K puisque seule la chimie de haute température été prise en compte. Dans la même équipe, Pascal Diévart a développé un modèle d'oxydation du n-décane au cours de sa thèse [159]. Ce modèle, incluant les réactions de basse température, a été validé par comparaison avec des résultats obtenus en réacteur auto-agité, tube à choc et réacteur tubulaire.

Un nouveau mécanisme d'oxydation du n-décane a été mis au point par Nehse et al. [147] en 1996. Ce modèle généré automatiquement par le logiciel LISP a été validé sur des données expérimentales en tube à choc.

En 1998, Glaude et al. [149] ont généré un modèle comprenant 1216 espèces et 7920 réactions grâce au logiciel EXGAS. Ce mécanisme a été validé sur les résultats de Ballès-Guéret et al. [162] en réacteur auto-agité. En 2000, Battin-Leclerc et al. [152] ont mis au point une nouvelle version de ce mécanisme qui a été confronté aux résultats expérimentaux de Delfau et al. [145] sur flamme plate riche en décane et à ceux de Dagaut et al. [146] en réacteur auto-agité. Dans les deux cas, l'accord modèle/expérience est satisfaisant. Enfin, ce mécanisme a été remanié une nouvelle fois par Biet et al. [160] en 2008, dans le cadre du projet BIOKIN en partenariat avec IFP Energies nouvelles ce qui a permis une nette amélioration de la prédictivité en réacteur auto-agité.

Zeppieri et al. [150] ont également créé un mécanisme squelettique d'oxydation du n-décane. Ce modèle, mis au point en 2000, présente la particularité de considérer tous les radicaux décyles en équilibre thermodynamique permanent. Le calcul de la concentration d'un de ces radicaux permet donc de déterminer celle des quatre autres. Ce mécanisme permet une bonne simulation de résultats expérimentaux obtenus en tube à choc, en réacteur auto-agité et en réacteur à écoulement. Zhao et al. [154] ont actualisé ce modèle en 2005 et l'ont utilisé pour simuler des vitesses de flamme.

En 2000, Lindstedt et al. [151] ont proposé un mécanisme détaillé comprenant 193 espèces et 1085 réactions. Ils ont pu simuler de manière correcte les résultats obtenus par Douté et al. [148] pour une flamme plate de prémélange décane/$O_2$/Ar.

Bikas et Peters [153] ont publié, en 2001, un mécanisme d'oxydation du n-décane mettant en jeu 67 espèces et 600 réactions. La confrontation de ce modèle avec des résultats expérimentaux obtenus en tube à choc, réacteur auto-agité et flamme laminaire de prémélange a été concluante.

En 2006, Olchanski et Burcat [157] ont simulé leurs délais d'auto-inflammation, obtenus en tube à onde de choc, grâce à un mécanisme détaillé d'oxydation du décane contenant 69 espèces et 433 réactions.

Moréac et al. [158] ont généré un modèle d'oxydation du n-décane à l'aide du logiciel REACTION. Ce mécanisme mettant en jeu 506 espèces et 3684 réactions permet de simuler les résultats expérimentaux de Pfahl et al. [163] de manière très correcte.

Enfin, Westbrook et al. [161] ont récemment mis au point un mécanisme cinétique permettant de simuler la réactivité des alcanes linéaires depuis le n-octane ($C_8H_{18}$) jusqu'au n-hexadécane ($C_{16}H_{34}$).

Le schéma cinétique de Diévart [159] a été choisi pour servir de base à notre travail de simulation de l'oxydation du n-décane lors de ce travail de thèse. Il s'agit en effet d'un mécanisme de taille raisonnable et valide dans une large gamme de conditions expérimentales. De plus, sa cinétique repose sur la base C0-C4 de Le Cong [144] également utilisée dans notre modèle quaternaire.

## 3.2 Modifications apportées

Comme expliqué ci-dessus, le sous-mécanisme utilisé dans cette étude repose sur celui mis au point par Pascal Diévart [159]. Néanmoins, si le mécanisme de Diévart s'avère très prédictif concernant les profils d'espèces en JSR, il a tendance à surestimer les délais d'auto-inflammation du n-décane à basse température. Une étude de sensibilité nous a permis de déterminer que 16 réactions de décompositions de radicaux cétohydroperoxydes avaient une grande influence sur ce phénomène. Les constantes de vitesse de ces 16 réactions ont donc été réévaluées afin de mieux prédire les délais d'auto-inflammation du n-décane à basse température. La valeur retenue pour les nouvelles constantes de vitesse s'inspire de celles proposées par Diévart [159]. Néanmoins, la valeur du facteur préexponentiel a été multipliée par 5 pour mieux représenter les résultats expérimentaux. L'expression de ces constantes de vitesse est donc :

$$k = 5.0\times10^{16}\ \exp\left(\frac{-445000}{RT}\right)\ (en\ cm^3.mol^{-1}.s^{-1})$$

Cette modification n'a qu'un impact limité sur les profils d'espèces en réacteur auto-agité tout en permettant une meilleure prédiction des délais d'auto-inflammation du n-décane à basse température.

## 3.3 Confrontations modèle/expériences

Les prédictions du modèle cinétique d'oxydation ont été confrontées à de nombreux résultats expérimentaux d'oxydation du n-décane trouvés dans la littérature afin de s'assurer de la viabilité du mécanisme sur une large gamme expérimentale. Tous les calculs ont été réalisés à l'aide des codes de calcul SENKIN et PSR du logiciel CHEMKIN [206-207]. Le Tableau III-3 recense les conditions expérimentales pour lesquelles le sous-mécanisme d'oxydation du n-décane a été testé. Dans la plupart des cas, les prédictions de notre modèle cinétique ont été comparées avec celle du mécanisme de Westbrook et al. [161].

Tableau III-3 : Conditions expérimentales testées pour la validation du sous-mécanisme du n-décane

| Référence | Dis. Exp. | $C_{10}H_{22}$ (%mol.) | Dilution (%mol.) | Φ | P (atm) | T (K) | Validation |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Pfahl et al. [163] | ST[a] | 0,67<br>0,90<br>1,34<br>2,64 | 78,47 $N_2$<br>78,29 $N_2$<br>77,94 $N_2$<br>76,92 $N_2$ | 0,50<br>0,67<br>1,00<br>2,00 | 13<br>50<br>13-50<br>13-50 | 650-1450<br>700-950<br>650-1350<br>650-1350 | Bonne à haute T<br>Satisfaisante à basse T |
| Davidson et al. [164] | ST[a] | 0,03 | 99,50 AR | 1,00 | 2 | 1450-1750 | Satisfaisante |
| Zhukov et al. [165] | ST[a] | 1,33 | 77,95 $N_2$ | 1,00 | 13-80 | 750-1350 | Satisfaisante |
| Shen et al. [166] | ST[a] | 0,34<br>0,67<br>1,34 | 78,74 $N_2$<br>78,74 $N_2$<br>77,94 $N_2$ | 0,25<br>0,50<br>1,00 | 10-35<br>12-50<br>11-40 | 950-1350<br>900-1250<br>900-1400 | Satisfaisante |
| Olchanski et al.[157] | ST[a] | 1,50 | 75,25 AR | 1,00 | 3,25 | 1350-1500 | Bonne |
| Horning et al. [167] | ST[a] | 0,20 | 96,70 AR | 1,00 | 1,2 | 1375-1525 | Satisfaisante |
| Kumar et al. [168] | RCM[b] | 0,67<br>1,07<br>0,77<br>1,07<br>1,07 | 78,46 $N_2$<br>78,14 $N_2$<br>89,34 $N_2$<br>89,09 $N_2$<br>91,44 $N_2$ | 0,50<br>0,80<br>1,20<br>1,69<br>2,22 | 14-30<br>7-30<br>14-30<br>14-30<br>14 | 675-750<br>625-700<br>650-800<br>650-725<br>650-725 | Bonne en milieu riche<br>Mauvaise en milieu pauvre |
| Zeppieri et al. [150] | FR[c] | 0,15 | 97,69 $N_2$ | 1,00 | 1 | 1019 | Satisfaisante |
| Dagaut et al. [146] | JSR[d] | 0,07<br>0,07<br>0,07<br>0,10 | 97,76 $N_2$<br>98,85 $N_2$<br>99,39 $N_2$<br>98,35 $N_2$ | 0,50<br>1,00<br>2,00<br>1,00 | 1<br>1<br>1<br>10 | 900-1150<br>900-1200<br>950-1300<br>550-1050 | Bonne |
| Biet et al. [160] | JSR[d] | 0,23 | 98,35 $N_2$ | 1,00 | 10 | 550-1050 | Satisfaisante |

[a]tube à choc
[b]machine à compression rapide
[c]réacteur à écoulement
[d]réacteur auto-agité

La figure III-1 illustre l'influence de la richesse sur les délais d'auto-inflammation du n-décane. Les prédictions de notre modèle cinétique et celles du modèle de Westbrook et al. [161] ont été comparées aux données expérimentales obtenues par Pfahl et al. [163] en tube à choc pour une pression de 13 bar et 3 richesses (0,5; 1 et 2). Les résultats expérimentaux suggèrent qu'une augmentation de la richesse entraine une diminution des délais d'auto-inflammation du n-décane dans le domaine de température allant de 700 à 1200 K. Notre

modèle reproduit bien cette tendance, tout comme celui de Westbrook et al. [161]. Le mécanisme cinétique développé durant cette thèse donne des résultats très satisfaisants dans les domaines de températures hautes et intermédiaires mais surestime les délais d'auto-inflammation à basse température (même si les modifications expliquées dans le paragraphe précédent ont permis de réduire les écarts entre les prédictions du modèle et les données expérimentales). En revanche, le modèle de Westbrook et al. [161] surestime légèrement l'amplitude de la zone NTC mais donne de meilleurs résultats à basse température.

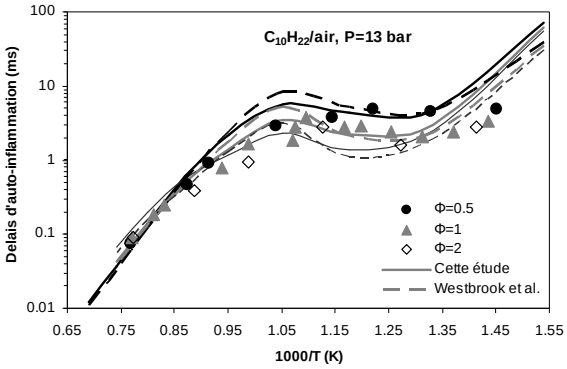



Figure III-1 : Influence de la richesse sur les délais d'auto-inflammation du n-décane (P=13 bar) [163]. Confrontation modèles (lignes) expériences (symboles).

La figure III-2 illustre quant à elle l'influence de la pression sur l'auto-inflammation du n-décane en tube à choc. Les prédictions de notre modèle cinétique et celles du mécanisme de Westbrook et al. [161] ont été comparées aux données expérimentales obtenues par Shen et al. [166] lors de la combustion d'un mélange n-décane/air à la stœchiométrie pour 2 pressions (11 et 40 atm). Les résultats expérimentaux suggèrent que les délais d'auto-inflammation du n-décane diminuent lorsque la température augmente. Cette tendance est bien représentée par les deux modèles même si, à 11 atm, les délais sont légèrement surestimés pour les températures inférieures à 1150 K dans les deux cas. A 40 atm, notre mécanisme prédit une inflammation plus rapide que celle par le modèle de Westbrook et al. [161] pour le domaine de température intermédiaire (950-1200 K).

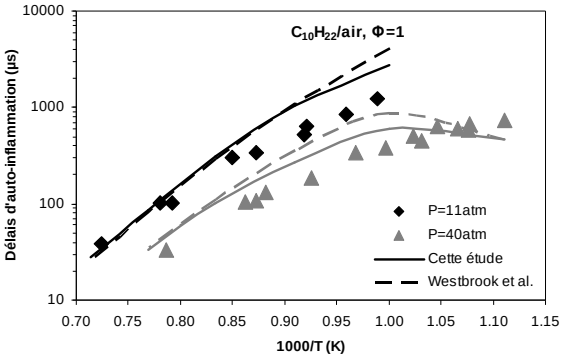



Figure III-2 : Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation du n-décane (phi=1) [166]. Confrontation modèles (lignes) expérience (symboles)

Zeppieri et al. [150] ont étudié l'oxydation du n-décane en mélange stœchiométrique dans un réacteur à écoulement, à pression atmosphérique et pour une température de 1019 K. La figure III-3 montre les profils des principales espèces formées dans ces conditions expérimentales. On voit bien sur cette figure que le modèle reproduit de manière satisfaisante les résultats expérimentaux même s'il a tendance à surestimer la quantité de CO au delà de 140 ms.

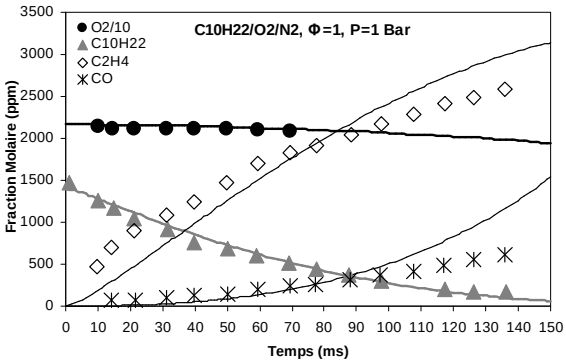



Figure III-3 : Profils d'espèces obtenus lors de l'oxydation du n-décane en réacteur à écoulement (phi=1, P=1 bar) [150]. Confrontation modèle (lignes) expérience (symboles).

Cette série de comparaisons avec des données expérimentales disponibles dans la littérature nous ont permis de nous assurer que le sous-mécanisme d'oxydation du n-décane utilisé dans ce travail de thèse est valide sur une large gamme expérimentale.

# 4. Sous-mécanisme d'oxydation de l'iso-octane

## 4.1 Mécanisme initial

Les iso-alcanes sont des hydrocarbures ramifiées. Ils possèdent donc d'avantage de liaison C-H primaires que les alcanes linéaires. Or, l'énergie des liaisons C-H primaires ($E_{C\text{-}H\ 1}$ > 60 kJ.mol$^{-1}$) est plus importante que celles des liaisons C-H secondaires ($E_{C\text{-}H\ 2}$ > 50 kJ.mol$^{-}$

[1]) ou tertiaires ($E_{C\text{-}H\ 3}$ > 40 kJ.mol$^{-1}$). L'oxydation des iso-alcanes est donc moins rapide que celle des alcanes linéaires. De plus, suivant l'implantation des ramifications le long de la chaîne carbonée, l'isomérisation des radicaux $ROO^{\bullet}$ et $^{\bullet}OOQO_2H$ (cf. réactions II-7 et II-9) peut être défavorisée. Il y a donc moins d'intermédiaires oxygénés produits pendant l'oxydation des iso-alcanes à basse température ce qui induit une réduction de la réactivité de ce type de composé. Le Tableau III-4 contient les principaux modèles cinétiques de l'iso-octane trouvés dans la littérature.

Un des premiers mécanismes d'oxydation de l'iso-octane a été mis au point par Westbrook et al. [169] en 1988. Ce modèle comprenant 324 espèces et 1303 réactions n'est prédictif qu'à haute température. Il a été repris par Chen et al. [170], en 2000, afin de simuler leurs profils expérimentaux obtenus en réacteur à écoulement, à haute pression et en milieu pauvre sur toute la gamme de température. En 2002, Curran et al. [171] ont repris le modèle de Chen et al. [170] afin de générer un nouveau mécanisme construit de manière systématique selon 25 catégories de réactions élémentaires. Les constantes de vitesse sont établies pour chacune des catégories du processus, sans ajustement des paramètres d'une réaction particulière à l'intérieur des blocs. Le mécanisme de Curran et al. [171] a été validé pour de nombreuses conditions expérimentales. Ce modèle a finalement été repris par Mehl et al. [172] en 2009 afin de mieux représenter les délais d'auto-inflammation de l'iso-octane en tube à choc et en machine à compression rapide.

Tableau III-4 : Mécanismes détaillés d'oxydation de l'iso-octane

| Références | Année | Nombre d'espèces | Nombre de réactions | Validation | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Réacteur | T (K) | P(atm) | Φ |
| Axelson et al. [173] | 1986 | 62 | 350 | FR[a] | 1080 | 1 | 1 |
| Westbrook et al. [169] | 1988 | 324 | 1303 | JSR[b]<br>ST[a] | 513-701<br>1000-1500 | 1<br>1 | 1<br>1 |
| Côme et al. [174] | 1996 | 463 | 2820 | JSR[b] | 600-850 | 10 | 1 |
| Ranzi et al. [175] | 1997 | 145 | 2500 | JSR[b]<br>ST[a]<br>FR[c]<br>RCM[d] | 550-1100<br>650-1300<br>800-1100<br>650-1300 | 10<br>36<br>1<br>13-16 | 1,5<br>0,5-2<br>0,3-1,5<br>1 |
| Chen et al. [170] | 2000 | 850 | 3570 | FR[c] | 915-950 | 3-9 | 0,05-1 |
| Glaude et al. [176] | 2002 | 647 | 2386 | JSR[b] | 550-1000 | 1-10 | 0,2-1 |
| Curran et al. [171] | 2002 | 860 | 3600 | JSR[b]<br>ST[a]<br>FR[c] | 700-1150<br>1000-1800<br>600-945 | 10<br>2,1-40<br>1-12,5 | 0,5-1,5<br>1<br>0,05-1 |
| Buda et al. [156] | 2005 | 351 | 1684 | ST[a]<br>RCM[d] | 650-1200<br>600-900 | 40-42<br>11-16 | 1<br>1 |
| Mehl et al. [172] | 2009 | 874 | 3796 | ST[a]<br>RCM[d] | 650-1200<br>600-900 | 40-42<br>11-16 | 1<br>1 |

[a]tube à choc
[b]réacteur auto-agité
[c]réacteur à écoulement
[d]machine à compression rapide

En 1996, Côme et al. [174] ont proposé un modèle d'oxydation de l'iso-octane et du n-heptane généré automatiquement par le logiciel EXGAS. Ce mécanisme a été repris par Glaude et al. [176] et validé en simulant les profils d'espèces obtenus en réacteur auto-agité en 1999. Enfin, ce mécanisme a été amélioré une nouvelle fois en 2005 par Buda et al. [156] afin de mieux reproduire les expériences en tube à choc et en machine à compression rapide.

En 1997, Ranzi et al. [175] ont simulé de façon satisfaisante de nombreux points expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité, tube à choc, réacteur à écoulement et machine à compression rapide grâce à un modèle cinétique généré automatiquement par le logiciel MAMOX.

Dans le cadre de ce travail de thèse notre choix s'est porté sur le mécanisme de Mehl et al. [172] qui s'avère très prédictif concernant les délais d'auto-inflammation de l'iso-octane tout en conservant une bonne précision sur les profils d'espèces formés lors de la combustion.

## 4.2 Modifications apportées

Les réactions d'oxydation de l'iso-octane développées par Mehl et al. [172] ont donc été incluses dans notre modèle. Néanmoins, le mécanisme de Mehl et al. [172] avait été développé à partir d'une base C0-C4 différente de celle utilisée dans cette étude. Le couplage avec la base de Le Cong a entrainé un changement dans la cinétique du modèle. Une étude de sensibilité nous a permis d'identifier les réactions responsables de ce décalage. Les constantes de vitesse des réactions incriminées ont donc été modifiées afin de mieux prédire les délais d'auto-inflammation de l'iso-octane. Notamment :

- Le facteur pré-exponentiel des quatre réactions de décomposition unimoléculaire de l'iso-octane a été multiplié par 10.
- Les 2 réactions de β-scission des radicaux iso-octyl ont été réécrites.
- Les constantes de vitesse de formation et décomposition du radical IC4H7O ont été réestimées.

L'ensemble des réactions modifiées dans le sous-mécanisme de l'iso-octane et leurs constantes de vitesse associées sont listées dans le Tableau III-5.

Tableau III-5 : Constantes de vitesse modifiées dans le sous-mécanisme de l'iso-octane

| Réactions | Constantes de vitesse* | | | Origines |
|---|---|---|---|---|
| | A | n | Ea | |
| YC7H15=IC4H7+CH3+C2H5 | $2.220\times10^{+20}$ | -2.06 | 32470.0 | estimée[a] |
| PC7H15=C3H7+CH3+C3H5 | $2.220\times10^{+20}$ | -2.06 | 32470.0 | estimée[b] |
| IC8H18=YC7H15+CH3 | $1.635\times10^{+28}$ | -2.79 | 83930.0 | estimée[c] |
| IC8H18=PC7H15+CH3 | $1.376\times10^{+27}$ | -2.59 | 85860.0 | estimée[c] |
| IC8H18=TC4H9+IC4H9 | $7.828\times10^{+30}$ | -3.93 | 84150.0 | estimée[c] |
| IC8H18=NEOC5H11+IC3H7 | $2.455\times10^{+24}$ | -2.01 | 83400.0 | estimée[c] |
| IC4H7+HO2=IC4H7O+OH | $7.000\times10^{+13}$ | 0.00 | -1000.0 | estimée[d] |
| IC4H7O=TC3H5+CH2O | $2.925\times10^{+22}$ | -2.39 | 35590.0 | estimée[d] |

* constantes de vitesses de la forme ($k=AT^n\exp(-Ea/RT)$ ; unités : $cm^3$, mol, s et cal.

[a] Constante de vitesse identique à celle utilisée par Mehl et al. [172] pour la réaction YC7H15=IC3H7+IC4H8

[b] Constante de vitesse identique à celle utilisée par Mehl et al. [172] pour la réaction PC7H15=TC4H9+C3H6

[c] Constante de vitesse estimée à 10 fois celle utilisée par Mehl et al.[172]

[d] Constante de vitesse estimée à 10 fois celle utilisée par Mehl et al. [172]

## 4.3 Confrontations modèle/expérience

Les prédictions du sous-mécanisme de l'iso-octane ont été confrontées aux données expérimentales disponibles dans la littérature. L'iso-octane étant un composé de référence, de nombreuses équipes ont étudiée son oxydation, aussi bien pour les délais d'auto-inflammation (tube à choc, machine à compression rapide) que pour les profils d'espèce (JSR, réacteur à écoulement). L'ensemble des conditions expérimentales utilisées pour la validation du sous-mécanisme d'oxydation de l'iso-octane sont résumées dans le Tableau III-6. Les prédictions de notre modèle cinétique ont été comparées avec celles obtenus grâce au mécanisme développé par Anderlohr et al. [177].

Tableau III-6 : Conditions expérimentales testées pour la validation du sous-mécanisme de l'iso-octane

| Référence | Réacteur | $IC_8H_{18}$ (% mol.) | Dilution (% mol.) | Φ | P (atm) | T (K) | Validation |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Vermeer et al. [178] | ST[a] | 2,20 | 70,00 $N_2$ | 1,00 | 2 | 1250-1750 | Bonne |
| Fieweger et al. [179] | ST[a] | 0,67 | 78,34 $N_2$ | 0,50 | 13-40 | 850-1250 | Bonne |
| | | 0,90 | 77,70 $N_2$ | 1,00 | 13-40 | 600-1350 | |
| | | 1,37 | 76,43 $N_2$ | 2,00 | 13-40 | 700-1300 | |
| Davidson et al. [180] | ST[a] | 0,50 | 93,25 AR | 1,00 | 1 | 1250-1750 | Bonne |
| Vanhove et al. [181] | RCM[b] | 1,65 | 77,69 $N_2$/AR/$CO_2$ | 1,00 | 12-16 | 650-900 | Satisfaisante |
| Chen et al. [170] | FR[c] | 0,08 | 78,92 $N_2$ | 0,05 | 6 | 925 | Satisfaisante |
| Dagaut et al. [182] | JSR[d] | 0,10 | 97,40 $N_2$ | 0,50 | 10 | 650-1150 | Satisfaisante |
| | | 0,10 | 98,65 $N_2$ | 1,00 | 10 | 650-1150 | |
| | | 0,10 | 99,07 $N_2$ | 1,50 | 10 | 750-1150 | |

[a]tube à choc
[b]machine à compression rapide
[c]réacteur à écoulement
[d]réacteur auto-agité

La figure III-4 illustre l'effet de la richesse sur l'auto-inflammation de l'iso-octane. Les données expérimentales obtenues par Fieweger et al. [179] lors de l'étude de l'iso-octane en tube à choc à 40 bar pour 3 richesses (0.5, 1 et 2) ont servis de base à notre simulation numérique. Entre 700 et 1000 K, les données expérimentales suggèrent que les mélanges riches s'auto-enflamment plus rapidement que les mélanges stœchiométriques et pauvres. Cette tendance est bien reproduite par les deux modèles. De même, la présence d'une zone de coefficient négatif de température est bien capturée par les deux mécanismes même si le schéma cinétique d'Anderlohr et al. [177] prédit des délais d'auto-inflammation plus longs que ceux prévus par notre modèle, quelle que soit la richesse.

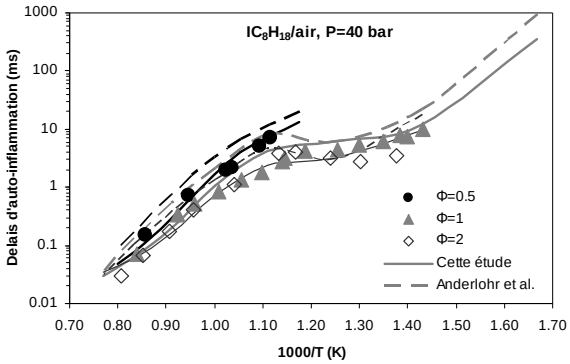



Figure III-4 : Influence de la richesse sur les délais d'auto-inflammation de l'iso-octane (P=40 bar) [179]. Confrontation modèles (lignes) expériences (symboles).

Vanhove et al. [181] ont étudié l'auto-inflammation de mélanges stœchiométriques iso-octane/$O_2$/diluant en machine à compression rapide pour une pression oscillant entre 12 et 16 atm. Les diluants sont un mélange $CO_2$/$N_2$/Ar dont la teneur entre chaque composé varie en fonction de la température désirée dans la chambre de combustion. La figure III-5 compare les résultats expérimentaux obtenus par Vanhove et al. [181] avec les prédictions de notre modèle et de celui de Anderlohr et al.[177]. Les deux mécanismes reproduisent correctement la zone de coefficient négatif de température visible aux alentours de 800 K. Les délais d'auto-inflammation pour la flamme principale et la flamme froide sont représentés de manière correcte par notre mécanisme même si les délais de la flamme principale sont légèrement sous-estimés sur tout le domaine de température étudié. A l'opposé, les prédictions du modèle d'Anderlohr et al. [177] sont en parfaite concordance avec les résultats expérimentaux concernant la flamme principale mais surestiment les délais de flamme froide pour les températures inférieures à 750 K.

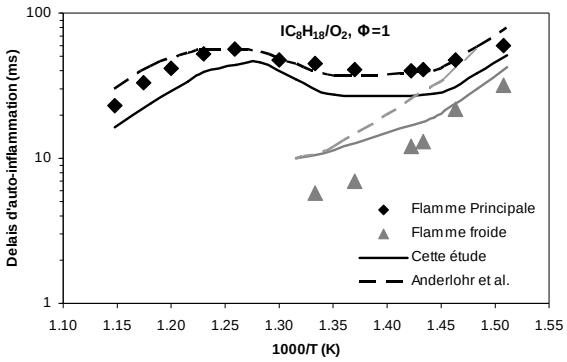



Figure III-5 : Confrontation modèles (lignes) expériences (symboles) pour l'auto-inflammation de l'iso-octane en machine à compression rapide (φ=1) [181].

La figure III-6 compare les profils expérimentaux et simulés des principales espèces formées lors de l'oxydation de l'iso-octane en réacteur à écoulement en milieu ultra-pauvre (φ=0,005) pour une pression de 6 atm et une température de 925K. Le modèle représente de manière satisfaisante la formation des principaux produits d'oxydation même si la réactivité de l'iso-octane est légèrement surestimée dans ces conditions.

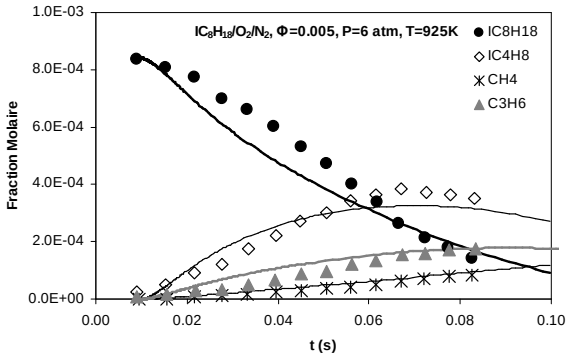



Figure III-6 : Profils d'espèces obtenus lors de l'oxydation ultra-pauvre de l'iso-octane en réacteur à écoulement (P=6atm, T=925K) [170]. Confrontation modèle (lignes) expérience (symboles).

Au final, la validité du sous-mécanisme d'oxydation de l'iso-octane utilisé lors de cette étude a été vérifiée pour diverses conditions expérimentales (richesse, pression, taux de dilution…).

# 5. Sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle

## 5.1 Mécanisme initial

La combustion de l'octanoate de méthyle n'a pas encore fait l'objet de beaucoup d'études à l'heure actuelle. Il y a donc très peu de mécanismes cinétiques disponibles pour ce composé. Parmi les rares schémas publiés on peut citer celui mis au point par Biet et al. [134]

en 2009. Ce modèle a été généré automatiquement à partir d'une nouvelle version du logiciel EXGAS permettant la conception de mécanismes cinétiques d'oxydation des esters méthyliques. En 2009, Togbé et al. [125] ont développé un mécanisme cinétique d'oxydation de l'octanoate de méthyle.

Le mécanisme de Togbé et al. [125] a été retenu pour représenter l'oxydation des esters méthyliques lors de ce travail de thèse. En effet, c'est un mécanisme de taille raisonnable ayant fait l'objet de nombreuses validations en réacteur auto-agité et en flamme de diffusion à contre-courant. De plus, sa cinétique repose sur la base $C_0$-$C_4$ de Le Cong [144] utilisée dans cette étude ce qui rend son couplage avec les autres sous-mécanismes plus simple.

## 5.2 Modifications apportées

La réactivité des esters méthyliques et des alcanes linéaires de taille correspondante étant très proche, la plupart des constantes de vitesses dérivent de celles utilisées par Curran et al. [110] pour l'oxydation du n-heptane. Néanmoins la présence d'un groupement methylacyloxy en bout de chaine induit quelques particularités, notamment :

- La liaison C-H du carbone adjacent à la fonction carbonyle est affaiblie [109].
- La liaison C-C à la jonction de la chaine alkyl et du groupement carbonyle est également plus faible que celle des alcanes linéaires. La constante de vitesse pour la rupture de cette liaison a donc été déterminée par analogie avec d'autres composés oxygénés [183-185].

## 5.3 Confrontations modèle/expérience

Les prédictions de notre sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle ont été comparées avec les rares données expérimentales disponibles dans la littérature. Les conditions expérimentales testées sont présentées dans le Tableau III-7. Dans tous les cas, les prédictions numériques de notre modèle ont été comparées avec celle obtenues via le mécanisme de Biet et al. [134] .

Tableau III-7 : Conditions expérimentales testées pour la validation du sous-mécanisme de l'octanoate de méthyle

| Références | Réacteur | $C_9H_{18}O_2$ (% mol.) | Dilution (% mol.) | Φ | P (atm) | T (K) | Validation |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Rotavera et al. [186] | ST[a] | 0,380 | 99,01 Ar | 0,50 | 10 | 1250-1550 | Satisfaisante |
| | | 0,074 | 99,00 Ar | 1,00 | 10 | 1250-1550 | |
| | | 0,138 | 99,00 Ar | 2,00 | 10 | 1325-1550 | |
| Dayma et al. [187] | JSR[b] | 0,100 | 97,81 $N_2$ | 0,60 | 1 | 800-1200 | Satisfaisante |
| | | 0,100 | 98,65 $N_2$ | 1,00 | 1 | 800-1200 | |
| | | 0,100 | 99,28 $N_2$ | 2,00 | 1 | 800-1250 | |

[a]tube à choc
[b]réacteur auto-agité

Rotavera et al. [186] ont été les premiers à étudier l'auto-inflammation de l'octanoate de méthyle en tube à choc. La figure III-7 représente les délais d'auto-inflammation expérimentaux et simulés de l'octanoate de méthyle pour une pression de 10 atm et 3 richesses différentes (0,5 ; 1 et 2). Notre modèle s'avère prédictif en milieu pauvre et à la stœchiométrie mais surestime les délais d'auto-inflammation en milieu riche. Inversement, le modèle de Biet et al. [134] surestime légèrement les délais d'auto-inflammation en milieu pauvre et à la stœchiométrie mais s'avère plus prédictif en milieu riche.

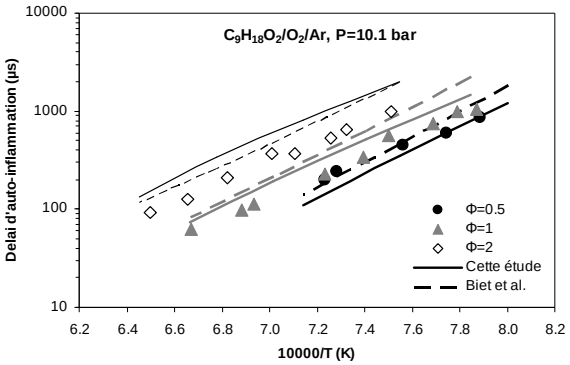



Figure III-7 : Influence de la richesse sur les délais d'auto-inflammation de l'octanoate de méthyle (P=10.1 bar) [186]. Confrontation modèles (lignes) expériences (symboles).

Le peu de données expérimentales disponibles concernant l'oxydation de l'octanoate de méthyle n'a pas permis une validation de notre sous-mécanisme sur une gamme expérimentale aussi diversifiée que pour les autres composés. Néanmoins, sur les conditions testées, le modèle s'avère prédictif aussi bien en terme de délais d'auto-inflammation que pour les profils d'espèces.

# 6. Sous-mécanisme d'oxydation de l'éthanol

## 6.1 Mécanisme initial

Un des premiers mécanisme cinétique décrivant l'oxydation de l'éthanol a été mis au point par Natarajan et Bhaskaran [188] en 1981. Plus tard, Dunphy et al. [189,190] ont étudié les délais d'auto-inflammation de l'éthanol en tube à choc et ont proposé un schéma cinétique contenant 29 espèces et 97 réactions. En 1992, Norton et Dryer [191] ont publié un mécanisme plus complet, validé en réacteur à écoulement. Les auteurs ont insisté sur la nécessité de prendre en compte les 3 isomères $C_2H_5O^{\bullet}$ pour simuler convenablement les polluants formés lors de l'oxydation de l'éthanol. La même année, Dagaut et al. [192] ont proposé un mécanisme cinétique d'oxydation de l'éthanol validé en réacteur auto-agité et tube à choc. En 1999, Marinov a mis au point un schéma cinétique détaillé de l'éthanol et l'a validé

sur une large gamme expérimentale. Ce mécanisme a depuis été repris et amélioré par de nombreuses équipes [125].

Tableau III-8 : Mécanismes cinétique d'oxydation de l'éthanol

| Références | Année | Nombre d'espèces | Nombre de réactions | Validation | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Réacteur | T (K) | P (atm) | Φ |
| Natarajan et al.[188] | 1981 | | | ST[a] | 1300-1700 | 1-2 | 0,5-2 |
| Dunphy et al.[189] | 1991 | 29 | 97 | ST[a] | 1080-1160 | 1,8-4,6 | 0,25-2 |
| Norton et Dryer[191] | 1992 | 32 | 142 | FR[b] | 1100 | 1 | 0,61-1,24 |
| Dagaut et al.[192] | 1992 | 25 | 76 | JSR[c] | 1000-1200 | 1 | 0,2-2 |
| | | | | ST[a] | 1080-1700 | 1-4,6 | 0,25-2 |
| Marinov [139] | 1999 | 56 | 351 | JSR[c] | 1000-1200 | 1 | 0,2-2 |
| | | | | FR[b] | 1100 | 1 | 0,61-1,24 |
| | | | | ST[a] | 1080-1700 | 1-4,6 | 0,25-2 |
| | | | | CF[d] | / | 1 | 0,55-1,8 |
| | | | | SF[e] | / | 1-8 | 0,7-1,4 |
| Saxena et al.[140] | 2007 | 57 | 288 | ST[e] | 1080-1700 | 1-4,6 | 0,25-2 |
| | | | | CF[f] | / | 1 | 0,55-1,8 |
| Li et al.[193] | 2007 | 39 | 238 | ST[a] | 1080-1700 | 1-4,6 | 0,25-2 |
| | | | | FR[b] | 800-950 | 3-12 | 0,3-1,4 |
| | | | | CF[d] | / | 1 | 0,55-1,8 |
| | | | | SF[e] | / | 1-8 | 0,7-1,4 |
| Cancino et al.[194] | 2010 | 136 | 1349 | ST[a] | 750-1660 | 1,8-49 | 0,25-2 |
| Leplat et al.[195] | 2011 | 36 | 252 | ST[a] | 1300-1700 | 1-2 | 0,5-2 |
| | | | | JSR[c] | 890-1250 | 1 | 0,25-2 |
| | | | | FFB[f] | / | 0,05 | 0,75-1,25 |
| | | | | SF[e] | / | 1-4 | 0,7-1,4 |

[a]tube à choc
[b]réacteur à écoulement
[c]réacteur auto-agité
[d]flamme à contre-courant
[e]bombe sphérique
[f]brûleur à flamme plate

Plus récemment, de nombreux travaux ont tenté d'améliorer les prédictions des modèles d'oxydation de l'éthanol, notamment à basse température. En 2007, Saxena et al. [140] ont simulé avec succès des délais d'auto-inflammations et des vitesses de flamme d'éthanol à l'aide de leur nouveau modèle. La même année, Li et al. [193] ont développé un modèle d'oxydation et l'ont validé sur une large gamme expérimentale. En 2010, Cancino et al. [194] ont couplé le mécanisme de Marinov [139] avec le sous-mécanisme C0-C3 de Konnov [141]. Le schéma ainsi obtenu a été validé par comparaison avec des délais d'auto-inflammation de l'éthanol obtenus en tube à choc à haute pression. Enfin, Leplat et al. [195] ont développé un nouveau schéma cinétique s'appuyant sur des constantes réactionnelles provenant du mécanisme GRI 3.0 [143] et du modèle de Marinov [139]. Le Tableau III-8 recense la plupart des mécanismes d'oxydation de l'éthanol trouvés dans la littérature.

Le mécanisme de Marinov [139] a été retenu pour simuler l'oxydation de l'éthanol au cours de ce travail de thèse. Il s'agit d'un mécanisme bien connu et largement validé qui a donné des résultats très satisfaisant en étant couplé au mécanisme de Togbé et al. lors d'une étude précédente [125].

## 6.2 Modifications apportées

Comme expliqué dans le paragraphe précédent, le mécanisme de Marinov a servi de base aux simulations numériques de l'oxydation de l'éthanol. La principale modification réalisée au sein du sous-mécanisme de l'éthanol au cours de cette thèse est l'ajout d'un bloc de réactions de basse température comme suggéré par Fournet et al.[196]. Les 26 réactions ajoutées sont listées dans le Tableau III-9 et consiste en l'addition d'une molécule d'oxygène sur les radicaux hydroxyethyles ($CH_3{}^{\bullet}CHOH$ et ${}^{\bullet}CH_2CH_2OH$) pour former des radicaux hydroxyethylperoxy. Ces radicaux vont ensuite s'isomériser via un cycle à 6 membres avant de se décomposer pour former de l'acétaldéhyde et des radicaux OH. L'ajout de ces réactions permet de mieux prédire la réactivité basse température des mélanges contenant une grande quantité d'éthanol.

Tableau III-9 : Constantes de vitesse ajoutées dans le sous-mécanisme de l'éthanol

| Réactions | Constantes de vitesse* | | | Origine |
|---|---|---|---|---|
| | A | n | Ea | |
| ch3choh+o2=c2h4ohqjB | $1.600\times10^{+19}$ | -2.50 | 0.0 | [196] |
| pc2h4oh+o2=c2h4ohqjA | $8.000\times10^{+18}$ | -2.50 | 0.0 | [196] |
| c2h4ohqjA=oh+hcoch2oh | $1.840\times10^{-02}$ | 4.78 | 34460.0 | [196] |
| c2h4ohqjA=c2h3ohqAjB | $1.760\times10^{-07}$ | 5.86 | 18110.0 | [196] |
| c2h4ohqjA=ho2+c2h3oh | $1.110\times10^{+10}$ | 1.41 | 32910.0 | [196] |
| c2h4ohqjA=c2h4oqA | $3.000\times10^{+09}$ | 0.77 | 22290.0 | [196] |
| c2h4ohqjB=c2h3ohjAqB | $6.400\times10^{-19}$ | 9.26 | 19820.0 | [196] |
| c2h4ohqjB=oh+ch3co2h | $1.080\times10^{+03}$ | 3.03 | 32999.0 | [196] |
| c2h4ohqjB=c2h4oqB | $1.740\times10^{+11}$ | 0.34 | 23170.0 | [196] |
| c2h4ohqjB=ch3hco+ho2 | $4.910\times10^{+10}$ | 0.66 | 12440.0 | [196] |
| c2h4ohqjB=ho2+c2h3oh | $3.480\times10^{+07}$ | 1.79 | 30380.0 | [196] |
| c2h3ohqAjB=ho2+c2h3oh | $2.960\times10^{+12}$ | 0.30 | 15290.0 | [196] |
| c2h3ohqAjB=oh+c2h4o(oh) | $8.860\times10^{+11}$ | 0.23 | 12570.0 | [196] |
| c2h3ohqAjB=oh+2ch2o | $9.070\times10^{+11}$ | 0.72 | 6360.0 | [196] |
| c2h3ohqAjB+o2=c2h3ohqAqjB | $1.600\times10^{+19}$ | -2.50 | 0.0 | [196] |
| c2h3ohqAqjB=>ho2+oh+ch2o+hco | $1.670\times10^{+09}$ | 1.00 | 21700.0 | [196] |
| c2h3ohjAqB=ho2+c2h3oh | $2.100\times10^{+10}$ | 1.19 | 18260.0 | [196] |
| c2h3ohjAqB=oh+c2h4o(oh) | $6.430\times10^{+09}$ | 1.25 | 12200.0 | [196] |
| c2h4oqB=ho2+ch3hco | $8.940\times10^{+12}$ | 0.20 | 13420.0 | [196] |
| c2h4oqB=>ch3+oh+h+co2 | $1.190\times10^{+12}$ | 0.59 | 10530.0 | [196] |
| c2h4oqB=oh+ch3co2h | $3.600\times10^{-05}$ | 5.29 | 15180.0 | [196] |
| c2h4o(oh)+h=h2+ch2o+hco | $1.760\times10^{+12}$ | 0.00 | 4570.0 | [196] |
| c2h4o(oh)+oh=h2o+ch2o+hco | $1.138\times10^{+06}$ | 2.00 | 914.0 | [196] |
| c2h4o(oh)+ho2=h2o2+ch2o+hco | $1.000\times10^{+11}$ | 0.00 | 15500.0 | [196] |
| c2h4o(oh)+ch3=ch4+ch2o+hco | $8.000\times10^{+10}$ | 0.00 | 9400.0 | [196] |
| c2h4o(oh)+o=oh+ch2o+hco | $4.820\times10^{+13}$ | 0.00 | 6856.0 | [196] |

* constantes de vitesses de la forme ($k=AT^n\exp(-Ea/RT)$ ; unités : $cm^3$, mol, s et cal.

## 6.3 Confrontation modèle/expérience

Les prédictions du modèle cinétique ont été confrontées avec divers résultats expérimentaux disponibles dans la littérature concernant l'oxydation de l'éthanol pur. Le mécanisme a été testé sur une large gamme expérimentale, comprenant des délais d'auto-inflammation en tube à choc et des profils d'espèces en réacteur auto-agité et en réacteur à écoulement (toutes les conditions expérimentales testées sont résumées dans le Tableau III-10). Nos simulations numériques ont également été comparées avec les prédictions du schéma cinétique développé par Saxena et al. [140].

Tableau III-10 : Conditions expérimentales testées pour la validation du sous-mécanisme de l'éthanol

| Références | Réacteur | $C_2H_5OH$ (% mol.) | Dilution (% mol.) | Φ | P (atm) | T (K) | Validation |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Natarajan et al. [188] | ST[a] | 1,43 | 90,00 AR | 0,5 | 1-2 | 1250-1650 | Satisfaisante |
| | | 2,50 | 90,00 AR | 1,0 | 1-2 | 1250-1750 | |
| | | 4,00 | 90,00 AR | 2,0 | 1-2 | 1250-1700 | |
| Dunphy et al. [190] | ST[a] | 1,25 | 91,25 AR | 0,5 | 3 | 1100-1500 | Bonne |
| | | 2,22 | 90,00 AR | 1,0 | 2-5 | 1100-1500 | |
| | | 2,50 | 93,75 AR | 2,0 | 3 | 1100-1500 | |
| Cancino et al. [194] | ST[a] | 6,39 | 74,42 $N_2$ | 1.00 | 10-50 | 800-1250 | Satisfaisante |
| | | 2,00 | 77.91 $N_2$ | 0.30 | 30 | 900-1200 | |
| Li et al. [193] | FR[b] | 0,30 | 98,80 $N_2$ | 1.00 | 9 | 830 | Satisfaisante |
| Dagaut et al. [192] | JSR[c] | 0,20 | 98,80 $N_2$ | 0,6 | 1 | 800-1100 | Satisfaisante |
| | | 0,20 | 99,20 $N_2$ | 1,0 | 1 | 800-1100 | |
| | | 0,20 | 99,50 $N_2$ | 2,0 | 1 | 800-1150 | |
| Leplat et al. [195] | JSR[c] | 0,20 | 98,60 $N_2$ | 0,5 | 10 | 850-1150 | Bonne |
| | | 0,20 | 99,20 $N_2$ | 1,0 | 10 | 850-1250 | |
| | | 0,20 | 99,50 $N_2$ | 2,0 | 10 | 850-1250 | |

[a]tube à choc
[b]réacteur à écoulement
[c]réacteur auto-agité

La figure III-8 illustre l'impact de la richesse sur l'oxydation de l'éthanol. Les prédictions de notre modèle cinétique et celles du modèle de Saxena et al. [140] ont été comparées avec les résultats expérimentaux obtenus par Natarajan et al. [188] lors de l'auto-inflammation de mélanges éthanol/$O_2$/Ar en tube à choc à une pression de 2 atm et pour 3 richesses (0,5; 1 et 2). Aucune tendance claire ne semble ressortir concernant l'impact de la richesse sur le domaine de température étudié. En revanche les deux modèles cinétiques reproduisent de manière satisfaisante les résultats expérimentaux.

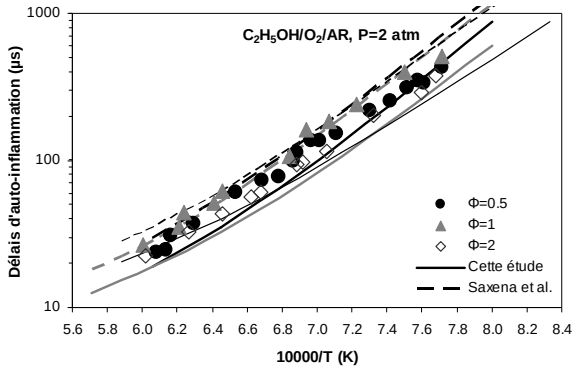



Figure III-8 : Influence de la richesse sur les délais d'auto-inflammation de l'éthanol (P=2 atm) [188]. Confrontation modèles (lignes) expériences (symboles).

La figure III-9 illustre l'influence de la pression sur l'auto-inflammation de l'éthanol. Les résultats expérimentaux publiés par Dunphy et al. [190] concernant l'auto-inflammation de mélanges éthanol/$O_2$/Ar en tube à choc à trois pressions (0,5 ; 1et 2) ont servi de base à nos simulations numériques. Les résultats expérimentaux suggèrent que les délais d'auto-inflammation diminuent lorsque la pression augmente. Cette tendance est bien captée par notre modèle comme par celui de Saxena et al. [140]. En outre, il semble que les prédictions de notre modèle soient plus proches des données expérimentales sur la plage de température allant de 1100 à 1250 K tandis que le mécanisme de Saxena et al. [140] est plus performant pour les températures supérieures à 1250 K.

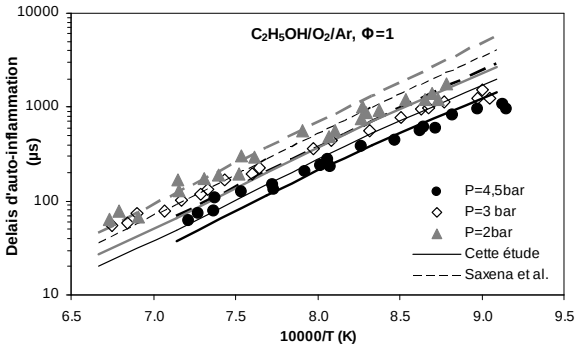



Figure III-9 : Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation de l'éthanol (phi=1) [190]. Confrontation modèles (lignes) expérience (symboles)

Li et al. [193] ont étudié l'oxydation stœchiométrique de l'éthanol en réacteur à écoulement à une température de 830 K et une pression de 9 atm. La figure III-10 représente les profils expérimentaux et simulés des principales espèces formées lors de cette expérience. Le modèle reproduit de manière correcte les profils des principales espèces même si la réactivité de l'éthanol est légèrement sous-estimée et que la formation de $CO_2$ est décalée de quelques dixièmes de seconde.

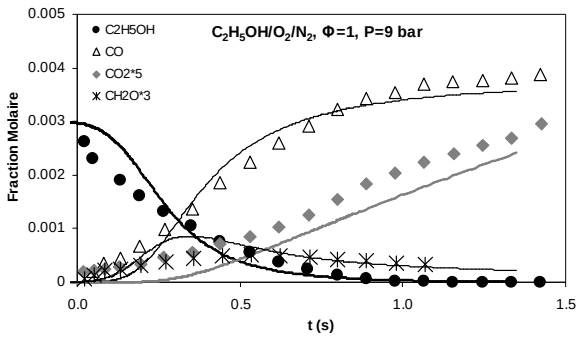



Figure III-10 : Profils d'espèce obtenus lors de l'oxydation d'éthanol en réacteur à écoulement (P=9 bar, T=830K, φ=1) [193]. Confrontation modèle (lignes) expérience (symboles).

La validité de chacun des 4 sous-mécanismes ayant été démontrée sur une large gamme de données expérimentales, il convient maintenant de les fusionner afin de construire le modèle quaternaire.

# 7. Mise au point du mécanisme quaternaire

## 7.1 Elaboration du mécanisme global

Le mécanisme final utilisé pour la modélisation de l'oxydation des mélanges F-T/EMHC/éthanol a été obtenu en regroupant les 4 sous-mécanismes développés pour les hydrocarbures purs. Les espèces impliquées dans plusieurs sous-mécanismes ont été renommées selon une nomenclature commune et les réactions doublon ont été supprimées. Le n-décane étant l'espèce la plus réactive du mélange (et dirigeant donc la réactivité globale du carburant), en cas de réaction doublon, la constante de vitesse issue du sous-mécanisme du n-décane a été conservée.

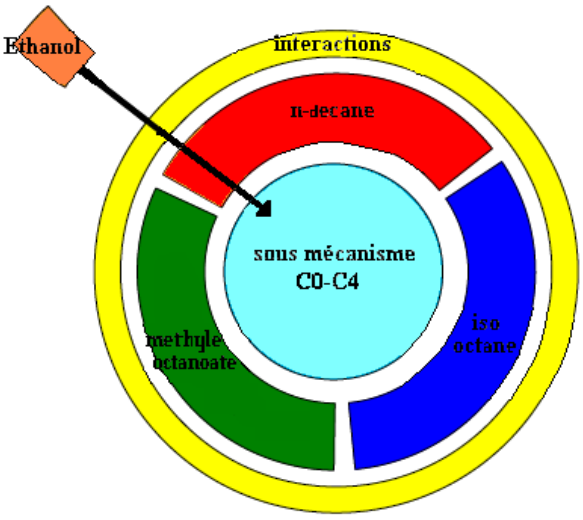



Figure III-11 : Organisation générale du schéma cinétique quaternaire

Le mécanisme final compte 2212 espèces et 9953 réactions. Les interactions entre les différents sous-mécanismes des 4 hydrocarbures constituant notre modèle ont lieux via le réservoir de radicaux commun de la base C0-C4. Nous verrons ci-après que ces réactions sont suffisantes pour décrire la cinétique de ce type de mélange.

## 7.2 Validation

Les prédictions du modèle ont également été testées face à des données expérimentales portant sur l'étude de l'oxydation de mélanges binaire simples comprenant 2 des 4 espèces décrites dans notre mécanisme cinétique quaternaire. Ces tests permettent de s'assurer que le couplage des 4 sous-mécanismes a bien fonctionné et que les réactions d'interaction entre les différents blocs sont suffisantes pour décrire la cinétique d'oxydation des mélanges. L'ensemble des conditions expérimentales testées sont résumées dans le Tableau III-11.

Tableau III-11 : Conditions expérimentales testées pour la validation du mécanisme quaternaire

| Référence | Cond. Exp. | Carburant (% mol.) | | | Dilution (% mol.) | Φ | P (bar) | T (K) | Validation |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $IC_8H_{18}$ | $C_9H_{18}O_2$ | $C_2H_5OH$ | | | | | |
| Cancino et al. [197] | ST[a] | 1.31 | 0 | 1.23 | 77.48 $N_2$ | 1.00 | 30 | 850-1250 | Satisfaisante |
| Togbé et al. [125] | JSR[b] | 0 | 0,0370 | 0,0450 | 98,90 $N_2$ | 0,50 | 10 | 550-1150 | Bonne |
| | | 0 | 0,0375 | 0,0375 | 98,76 $N_2$ | 0,50 | 10 | 550-1150 | |
| | | 0 | 0,0600 | 0.0150 | 98,34 $N_2$ | 0,50 | 10 | 550-1150 | |
| | | 0 | 0,0375 | 0,0375 | 99,34 $N_2$ | 1,00 | 10 | 550-1150 | |
| | | 0 | 0,0600 | 0,0150 | 99,13 $N_2$ | 1,00 | 10 | 550-1150 | |
| | | 0 | 0,0675 | 0,0065 | 99,06 $N_2$ | 1,00 | 10 | 550-1150 | |
| | | 0 | 0,0675 | 0,0065 | 99,49 $N_2$ | 2,00 | 10 | 550-1150 | |

[a]tube à choc
[b]réacteur auto-agité

Cancino et al. [197] ont étudié l'auto-inflammation d'un mélange iso-octane/éthanol (75/25 %vol.) en tube à choc (φ=1, P=30 bar). La figure III-12 représente leurs résultats expérimentaux ainsi que les prédictions de notre modèle et celles du mécanisme d'Anderlohr et al. [177]. On voit bien que notre modèle représente convenablement l'auto-inflammation du mélange iso-octane/éthanol même s'il surestime les délais pour les températures inférieures à 950 K.

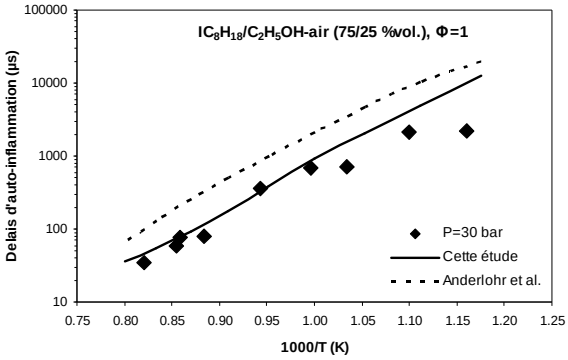



Figure III-12 : Confrontation modèles (lignes) expériences (symboles) pour l'auto-inflammation d'un mélange iso-octane/éthanol en tube à choc (P=30 bar, φ=1) [197].

Le modèle quaternaire a également été validé par comparaison avec les profils d'espèces obtenus par Togbé et al. [125] lors de l'étude de mélanges octanoate de méthyle/éthanol en réacteur auto-agité. La figure III-13 représente les profils expérimentaux ainsi que les prédictions du modèle lors de l'oxydation d'un mélange octanoate de méthyle/éthanol (80/20 %mol.) à la stœchiométrie pour une pression de 10 atm. On voit bien que le mécanisme cinétique reproduit de manière satisfaisante les profils d'espèces des deux réactifs ainsi que ceux des principaux produits formés au cours de cette expérience.

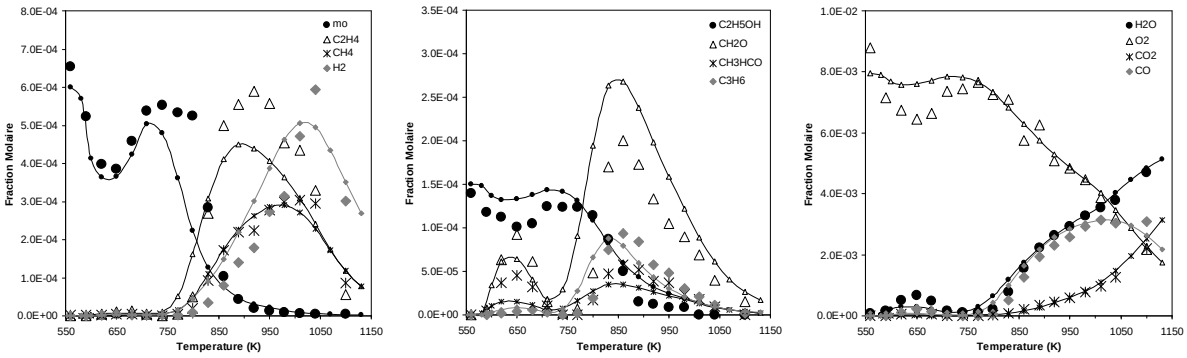



Figure III-13 : Profils d'espèce obtenus lors de l'oxydation d'un mélange octanoate de méthyle/éthanol (80/20 %mol.) en JSR (P=10 atm, φ=1) [125]. Confrontation modèle (lignes) expérience (symboles).

# 8. Conclusion

Afin de simuler l'oxydation de mélange F-T/EMHC/éthanol, un mécanisme cinétique d'oxydation quaternaire a été développé. Ce schéma cinétique comprenant 2212 espèces et 9953 réactions est le résultat du couplage de 4 sous-mécanismes d'oxydation des espèces modèles identifiées dans le Chapitre 2 comme étant représentatives des mélanges F-T/EMHC/éthanol : le n-décane, l'iso-octane, l'octanoate de méthyle et l'éthanol.

La base $C_0$-$C_4$ de ce mécanisme est issue des travaux de Le Cong [144]. Certaines réactions dépendantes de la pression ont été réécrites selon le formalisme Troe afin de rendre le modèle plus souple et utilisable à toute pression. Nous avons ajouté à cette base un sous-mécanisme d'oxydation du n-décane provenant des travaux de Diévart [159]. Les constantes de vitesse des réactions de décomposition des cétohydroperoxydes ont été modifiées afin de mieux simuler les délais d'auto-inflammation du n-décane à basse température. Les réactions relatives à l'oxydation de l'iso-octane proviennent des travaux de Mehl et al. [172]. Un sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle provenant des travaux de Togbé et al. [125] a également été ajouté. Enfin, le sous-mécanisme d'oxydation de l'éthanol a pour origine le modèle de Marinov [139] auquel ont été ajoutées des réactions de basse température [196].

Ce mécanisme a ensuite été confronté à des résultats expérimentaux (délais d'auto-inflammation et profils d'espèces) issus de la littérature pour l'oxydation de composés purs et de mélanges simples. Les prédictions du modèle quaternaire s'avèrent en bon accord avec l'expérience dans la grande majorité des cas testés. Dans le chapitre suivant, les prédictions de notre modèle quaternaire seront testées face aux résultats expérimentaux obtenus au cours de ce travail de thèse lors de l'oxydation de mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol en réacteur auto-agité.

# Chapitre IV
# Étude expérimentale de l'oxydation de constituants de biocarburant en JSR

# 1. Introduction

Comme nous avons pu le voir au chapitre II, il y a peu de résultats expérimentaux pour l'oxydation de mélanges complexes n-alcane/composés oxygénés disponibles dans la littérature. Or, dans un contexte où les biocarburants sont de plus en plus mélangés avec les carburants traditionnels, il est indispensable de comprendre les phénomènes chimiques régissant l'oxydation de ce type de mélange pour maitriser les émissions polluantes des véhicules modernes. Il est donc nécessaire de compléter les bases de données expérimentales et de développer des modèles cinétiques permettant une meilleure représentation du comportement des mélanges de biocarburants.

Ce chapitre présente les résultats expérimentaux obtenus lors de l'oxydation à haute pression de mélanges d'espèces modèles (n-décane, iso-octane, octanoate de méthyle, éthanol) représentatifs des mélanges F-T/EMHC/éthanol. Les résultats obtenus, à savoir les profils de concentration des réactifs et des principaux produits de combustion, sont présentés en fonction de la température. Le modèle cinétique développé au chapitre précédent a été utilisé pour simuler nos résultats expérimentaux et déterminer les voies majoritaires de dégradation des 4 réactifs constitutifs du mélange.

# 2. Présentation du réacteur auto-agité par jet gazeux

## 2.1 Principe de fonctionnement

Le réacteur auto-agité par jet gazeux ou Jet Stirred Reactor (JSR) permet d'étudier les mécanismes d'oxydation des hydrocarbures en fonction de la température, de la pression, de la richesse et du temps de séjour des gaz dans la zone réactionnelle. Le réacteur que nous avons utilisé a été mis au point par Dagaut et al.[198]. Au sein du réacteur auto-agité, la vitesse du mélange est supposée infiniment rapide par rapport au temps de séjour des gaz dans la zone réactionnelle. Les fractions molaires des espèces et la température sont donc théoriquement homogènes en tout point du réacteur. En l'absence de phénomènes de diffusion, la vitesse de conversion des réactifs en produits est donc contrôlée uniquement par la cinétique chimique.

## 2.2 Description du réacteur auto-agité

Le dispositif expérimental utilisé au cours de ce travail de thèse est constitué de trois parties principales : le vaporisateur, la chambre réactionnelle et le système de prélèvement. La Figure IV-1 présente un schéma détaillé du réacteur auto-agité.

Les carburants étudiés sont généralement sous forme liquide à température ambiante. Il est donc nécessaire de les faire passer sous forme gazeuse pour pouvoir étudier leur oxydation en réacteur auto-agité. A cette fin, le carburant liquide est acheminé jusqu'à un ensemble

atomiseur-vaporisateur à l'aide d'une pompe HPLC. Il est ensuite injecté sous pression dans l'atomiseur au niveau de l'orifice annulaire où il va être atomisé grâce un flux d'azote appelé azote auxiliaire. Le brouillard ainsi formé va ensuite pénétrer dans le vaporisateur constitué de grilles insérées dans une enceinte chauffée à une température légèrement supérieure à la température de vaporisation du composé étudié. Le réactif ainsi vaporisé, est alors introduit dans le réacteur par un tube capillaire en quartz.

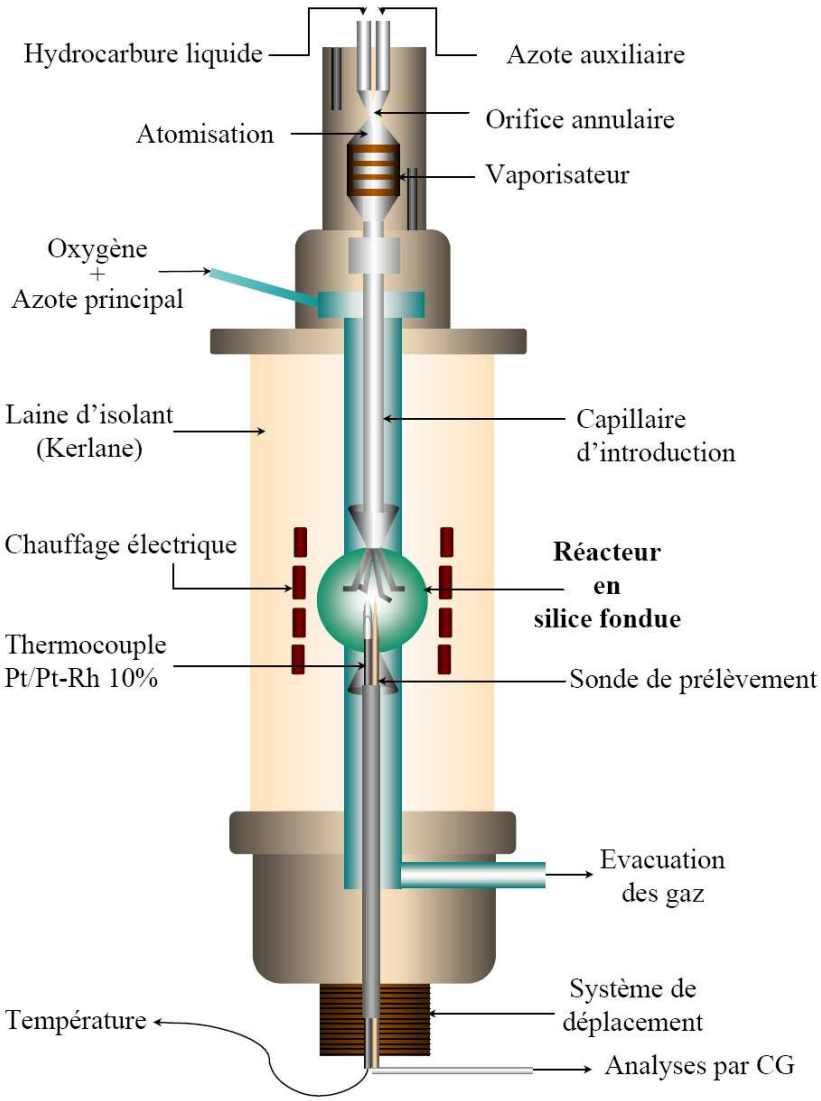



Figure IV-1 : Schéma du réacteur auto-agité par jets gazeux

La zone réactionnelle proprement dite se présente sous la forme d'une sphère en silice fondue dont le volume est de 29,5 $cm^3$. Un dispositif de préchauffage permet d'amener l'ensemble des composés gazeux à une température proche de celle étudiée avant même leur injection dans le réacteur. Cela permet de minimiser les différences de température en son sein, et donc de favoriser l'homogénéisation en température. L'admission des gaz se fait par quatre injecteurs ayant un diamètre de sortie de 1 mm et des directions de jet opposées deux à deux pour assurer une bonne homogénéité dans l'ensemble du volume réactionnel. Dans la

zone de mélange, le carburant est mis en contact avec les flux d'oxygène et d'azote principal acheminés par un circuit parallèle à celui de l'hydrocarbure pour éviter toute réaction prématurée en amont du réacteur. Le flux d'azote principal sert à diluer le réactif de manière à éviter l'apparition d'un gradient de température élevé. Nous sommes donc bien en présence d'une oxydation homogène, uniquement contrôlée par la cinétique chimique de combustion. Un thermocouple Pt/Pt-Rh 10% gainé de quartz est utilisé pour mesurer la température des gaz tout au long du processus. Le réacteur est placé dans un four permettant d'étudier la cinétique de réaction jusqu'à 1300 K environ. Cet ensemble four-réacteur est lui-même localisé au sein d'une enceinte pressurisable permettant de travailler à haute pression (jusqu'à 10 atm).

Les produits formés lors de la combustion sont prélevés à l'aide d'une sonde sonique en quartz. Le maintient d'une différence de pression importante entre les gaz dans le réacteur (10 atm) et la sonde de prélèvement (50 mbar) permet de figer la réaction et ainsi d'obtenir un mélange gazeux contenant les produits de combustion. Une ligne en téflon, chauffée à 175°C, prolonge la sonde jusqu'à la cellule d'analyse du spectromètre infrarouge et permet d'éviter toute condensation. Les produits formés sont alors analysés en ligne par FTIR. A la sortie de cette ligne chauffée, un tube en Teflon achemine également les gaz dans un ballon en Pyrex préalablement vidé grâce à une pompe à palettes. Les gaz sont alors prélevés et stockés en vue d'une analyse chromatographique ultérieure.

## 2.3 Calcul des débits

Le calcul des débits gazeux est effectué à partir de l'expression du temps de passage τ des gaz dans le réacteur (cf. équation IV-1). Lors des expériences réalisées au cours de cette thèse, le temps de passage τ reste constant tandis que la température varie ce qui nécessite de diminuer les débits de réactifs lorsque la température augmente.

$$\tau = \frac{V_r}{D_r} \frac{T_{amb}}{T} \frac{P}{P_{amb}} \qquad \text{(E IV-1)}$$

Avec $\tau$ temps de passage moyen des gaz dans le réacteur (s)
$V_r$ volume du réacteur ($cm^3$)
$D_r$ débit total à l'entrée du réacteur ($cm^3/s$)
$T_{amb}$ température ambiante (K)
$T$ température de travail (K)
$P_{amb}$ pression ambiante (atm)
$P$ pression de travail (atm)

A partir de cette équation et des fractions molaires $X_i$ à l'entrée du réacteur il est possible de calculer le débit gazeux de chacun des réactifs grâce à l'équation IV-2 :

$$D_i = X_i D_i = X_i \frac{V_r}{\tau} \frac{T_{amb}}{T} \qquad \text{(E IV-2)}$$

L'hydrocarbure étant injecté sous forme liquide, il est nécessaire d'exprimer le débit de liquide à injecter $D_{HC}(l)$ en fonction du débit gazeux voulu $D_{HC}(g)$ (cf. équation IV-3).

$$D_{HC}(l) = D_{HC}(g) \frac{MP_{amb}}{\rho R T_{amb}} \qquad \text{(E IV-3)}$$

Avec M masse molaire du carburant ($g.mol^{-1}$)
P masse volumique du carburant ($g.cm^3$)

## 2.4 Analyse des échantillons

### 2.4.1 Analyse FTIR

La spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (ou Fourier Transformed Infra Red, FTIR) est une technique d'analyse basée sur l'absorption de rayonnement infrarouge par les gaz à analyser. Elle permet, via la détection de vibrations spécifiques de certaines liaisons chimiques, d'effectuer l'analyse des espèces présentes dans les gaz. En effet, lorsque la longueur d'onde du faisceau lumineux est voisine de celle de l'énergie de vibration de la molécule analysée cette dernière va absorber le rayonnement et une diminution de l'intensité transmise pourra être mesurée. L'analyse FTIR consiste alors à examiner les spectres d'absorption de ces gaz et à distinguer la contribution de chaque espèce par rapport à des spectres étalons, ce qui permet de déterminer les produits en présence ainsi que leurs quantités.

Cependant, il est important de noter que seules les liaisons polaires absorbent dans l'infrarouge. Les molécules diatomiques symétriques ne sont donc pas détectées par FTIR ($O_2$ et $H_2$ par exemple). De plus, les hydrocarbures d'une même famille ont des spectres d'absorption similaires. C'est pourquoi l'analyse spectroscopique FTIR est complétée par l'analyse chromatographique en phase gazeuse.

Le spectromètre utilisé durant cette étude est un Nexus. La gamme de nombre d'onde étudiée, comprise entre 500 $cm^{-1}$ et 3500 $cm^{-1}$, permet d'évaluer les principales espèces présentent dans les gaz en sortie de réacteur. Dans notre cas, l'analyse FTIR permet de mesurer les concentrations en $H_2O$, $CO_2$, CO, $CH_2O$, $CH_3OH$, $CH_4$, $C_2H_2$, $C_2H_4$, $C_2H_6$ et $C_3H_6$.

### 2.4.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse

Les échantillons prélevés dans les ballons sont stockés à une pression de 50 mbar environ. Afin de conserver une bonne sensibilité avec les appareils utilisés, les gaz sont comprimés à l'aide d'un piston thermostaté à une pression proche de 1 bar avant d'être injectés dans les différents chromatographes.

La Chromatographie en Phase Gazeuse (CPG) est une technique d'analyse qui permet la séparation des constituants d'un mélange selon leur affinité respective entre la phase mobile (gaz vecteur) et la phase stationnaire (colonne). Les espèces qui s'associent fortement avec les particules composant la phase stationnaire sont retenues plus longtemps si bien que chaque constituant traverse la colonne en un temps caractéristique, appelé temps de rétention. Trois chromatographes sont utilisés pour analyser la totalité des produits suivis. Leur fonctionnement est brièvement abordé ci-après et le Tableau IV-1 regroupe leurs conditions d'utilisations.

Dans un premier temps, les échantillons sont injectés dans un chromatographe Varian 3400 équipé d'une colonne en alumine et d'un détecteur à ionisation de flamme (FID) permettant la détection des produits d'oxydation hydrocarbonés comportant de 1 à 6 atomes de carbone. Un deuxième chromatographe, équipé une colonne DB624 et un détecteur à ionisation de flamme permet non seulement la détection des hydrocarbures mais également celle des composés oxygénés (aldéhydes, cétones…). De plus cette colonne permet une séparation rapide des composés de haute masse molaire (plus de 6 atomes de carbone). Enfin, l'hydrogène et l'oxygène moléculaires sont dosés au moyen d'un chromatographe Varian 3300 équipé d'une colonne CP-carboPlot P7 et d'un détecteur à conductibilité thermique (TCD). Le gaz vecteur utilisé est l'azote et non l'hélium comme pour les autres chromatographes car $H_2$ et He ont une conductibilité thermique trop proche pour que le catharomètre puisse détecter avec précision la présence de l'hydrogène.

Tableau IV-1 : Conditions d'utilisation des différents chromatographes

| Chromatographe | Colonnes | Détecteurs | Gaz vecteur | Programmation en température | Produits dosés |
|---|---|---|---|---|---|
| Varian 3300 | CB-CarboPlot P7<br>L = 10 m<br>$D_{int}$ = 0.53 mm<br>$D_f$ = 1 µm | TCD | $N_2$<br>15 mL.min$^{-1}$ | T = 35°C<br>t = 1,7 min<br>isotherme | $H_2$<br>$O_2$ |
| Varian 3400 | CP-$Al_2O_3$/KCl<br>L = 50 m<br>$D_{int}$ = 0.32 mm<br>$D_f$ = 1 µm | FID | He<br>1,5 mL.min$^{-1}$ | $T_i$ = 70 °C<br>$t_i$ =<br>$T_f$ = 200 °C<br>$t_f$ = 26 min | HC<C7 |
| Varian 3800 | DB624<br>L = 60 m<br>$D_{int}$ = 0.32 mm<br>$D_f$ = 1 µm | FID | He<br>1,5 mL.min$^{-1}$ | $T_i$ = 40 °C<br>$t_i$ = 10 min<br>$T_f$ = 250 °C<br>$t_f$ = 10 min | HC>C6 |

La quantification des espèces détectées par chromatographie en phase gazeuse nécessite un étalonnage préalable, permettant de relier le signal détecté (exprimé en unités arbitraires et correspondant à l'aire du pic sous la courbe) à la fraction molaire du composé. Cet étalonnage externe est effectué à partir d'étalons gazeux pour les composés majoritaires. Pour les autres espèces, le coefficient de réponse est généralement déterminé à partir de la règle du nombre

de carbone effectif (ECF) [199] et des coefficients de réponse des composés de structure chimique voisine.

### 2.4.3 Analyse par spectrométrie de masse

La dernière colonne chromatographique est reliée à un spectromètre de masse. La spectrométrie de masse est une méthode d'analyse qualitative permettant d'identifier les nombreux produits intermédiaires d'oxydation se formant au cours de la combustion des composés étudiés. Le composé sortant de la colonne chromatographique est ionisé par bombardement électronique à 70 eV. Des ruptures de liaisons entraînent la formation d'ions fragments caractéristiques de la molécule initiale. Les fragments pénètrent ensuite dans l'analyseur quadripolaire constitué de quatre électrodes de section hyperbolique parallèles deux à deux. Ils sont alors séparés par un champ électro-magnétique en fonction de leur rapport masse/charge et collectés par un détecteur qui amplifie le signal associé aux ions. L'ensemble des fragments constitue le spectre de masse dont la lecture permet la détermination de la structure moléculaire. Chaque spectre est comparé à ceux disponibles dans la bibliothèque informatique du logiciel en vue d'une identification.

## 2.5 Répétabilité et incertitude de mesure

### 2.5.1 Répétabilité des essais

La répétabilité des essais en réacteur auto-agité par jet gazeux a été estimée lors d'une étude de Dagaut et al. [200]. Ces tests avaient pour but d'étudier l'oxydation du n-heptane lors de deux expériences réalisées avec un an d'intervalle dans des conditions similaires. Les résultats révèlent une très bonne répétabilité puisque les profils d'espèces sont superposables d'une année sur l'autre.

### 2.5.2 Estimation de l'incertitude de mesure

La validation des modèles cinétiques est tributaire des résultats expérimentaux. Il est donc nécessaire d'évaluer l'incertitude associée à ces résultats afin de pouvoir relativiser la précision des modèles. Les deux principales sources d'incertitude sur les données expérimentales sont le dispositif expérimental et le système analytique.

En ce qui concerne le dispositif expérimental, la composition réelle du mélange gazeux introduit dans le réacteur est tributaire des débits imposés en azote, oxygène et hydrocarbure. Ainsi, malgré la précision des dispositifs de contrôle, il n'est pas possible d'appliquer les débits théoriquement nécessaires pour obtenir la composition initialement souhaitée. Les débimètres sont étalonnés (coefficient des courbes d'étalonnage supérieurs à 0,995) mais il subsiste toujours une erreur liée à la conversion des débits en tension de consigne. D'autre part, malgré toutes les précautions prises, il est difficile d'assurer une température parfaitement homogène en tout point du réacteur (on estime toutefois que la variation de

température ne dépasse pas 5 K dans l'ensemble du réacteur). Ces incertitudes sur la température et la composition du mélange gazeux se répercutent sur le temps de passage et par conséquent sur la composition des gaz en sortie de réacteur.

Concernant le dispositif d'analyse, plusieurs facteurs peuvent être mis en cause pour expliquer l'erreur sur la mesure : erreur sur les coefficients de réponse, incertitude sur les étalons et la pression d'injection du gaz, séparation difficile de certains pics… En tenant compte de tous ces paramètres, on peut estimer l'incertitude globale sur les résultats expérimentaux inférieure à 15 %.

# 3. Étude de l'oxydation de mélanges binaires

## 3.1 Protocole expérimental

Durant cette première série d'expérience réalisée à 10 atm, nous avons utilisé un mélange binaire n-décane/iso-octane (68/32 %mol.) représentatif d'un carburant GtL. Les expériences ont été réalisées à 3 richesses (0,5 ; 1 et 2) avec des mélanges fortement dilués dans l'azote ($X_{N2}$ > 0,95) afin de limiter les dégagements de chaleur dans la zone réactionnelle. Le temps de passage des gaz dans le réacteur a été fixé à 1 s, valeur comprise dans le domaine où le réacteur est parfaitement agité, et permetant d'observer convenablement l'oxydation de basse température qui a alors le temps de se développer. L'ensemble des conditions expérimentales relatives aux travaux menés en réacteur auto-agité avec les mélanges binaire durant cette thèse est récapitulé dans le Tableau IV-2.

Tableau IV-2 : Conditions expérimentales d'oxydation du mélange n-décane/iso-octane en JSR

| Mélange | φ | Température (K) | Pression (atm) | Temps de passage (s) | Quantités initiales (ppm) | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | $C_{10}H_{22}$ | $iC_8H_{18}$ | $O_2$ |
| GtL | 0,5 | 560-1100 | 10 | 1 | 1020 | 470 | 43549 |
| | 1 | 560-1100 | 10 | 1 | 1020 | 470 | 21774 |
| | 2 | 560-1100 | 10 | 1 | 1020 | 470 | 10887 |

## 3.2 Résultats expérimentaux et validation du mécanisme

Ces expériences nous ont permis d'obtenir l'évolution des concentrations des réactifs, des produits et des principaux intermédiaires stables en fonction de la température. Les résultats expérimentaux obtenus lors de ces essais ont été comparés aux prédictions du modèle cinétique (cf. Figures IV-2 à IV-4).

Les produits majoritaires, détectés et identifiées lors de cette étude sont : le dioxyde de carbone ($CO_2$), le monoxyde de carbone (CO), l'eau ($H_2O$), l'hydrogène ($H_2$), le méthane ($CH_3$), l'éthylène ($C_2H_4$), l'acétylène ($C_2H_2$), le propène ($C_3H_6$), le butène ($C_4H_8$), l'iso-butène

($iC_4H_8$), le 1,3-butadiène ($C_4H_6$), le pentène ($C_5H_{10}$), l'hexène ($C_6H_{12}$) le formaldéhyde ($CH_2O$), l'acétaldéhyde ($CH_3HCO$), le propanal ($C_2H_5HCO$), l'acroléine ($C_2H_3HCO$), le butanal ($C_3H_7HCO$), le méthanol ($CH_3OH$) et l'acétone ($CH_3COCH_3$). La totalité des produits identifiés lors de cette étude ont été précédemment répertoriés lors de l'oxydation de l'iso-octane pur et du n-décane pur. Ce mélange ne forme donc pas de composés spécifiques provenant d'une interaction entre les sous-mécanismes des deux hydrocarbures initiaux.

Les résultats expérimentaux obtenus à la stœchiométrie et les prédictions du modèle sont présentées sur la Figure IV-3. Dans ces conditions, on peut remarquer l'existence d'une zone de coefficient négatif de température (NTC) entre 650 et 750 K. Le mécanisme représente de manière correcte l'oxydation des deux réactifs et la formation des principaux produits. Néanmoins, la réactivité à basse température de l'iso-octane est légèrement sous-estimée. De plus, le modèle surestime la production de méthane à haute température et sous-estime la fraction molaire d'acétaldéhyde sur tout le domaine de température.

En milieu pauvre, on remarque que l'oxydation des deux réactifs est amplifiée à basse température (cf. Figure IV-2). De plus, le NTC présente une amplitude moins marquée qu'à la stœchiométrie. Cette tendance est bien reproduite par le modèle même si la réactivité de l'iso-octane et du n-décane est légèrement sous-estimée à basse température. Concernant la formation des produits majoritaires, les prédictions du mécanisme s'avèrent satisfaisantes. Néanmoins, les quantités d'acétaldéhyde formées sont à nouveau sous-estimées par le modèle sur toute la gamme de température.

En milieu riche, la réactivité de basse température est légèrement réduite pour les deux réactifs (cf. Figure IV-4). De plus, l'amplitude du coefficient négatif de température est plus marquée qu'à la stœchiométrie. On constate également que la concentration plus faible en oxygène dans le milieu réactionnel entraine la formation d'intermédiaires stables en plus grande quantité à haute température. Cette augmentation résulte de la réduction du pool radicalaire lorsque la quantité d'oxygène diminue. Ces tendances sont bien reproduites par le modèle. Cependant, l'amplitude du NTC est sous-estimée par le mécanisme dans ces conditions. Globalement, le modèle représente correctement les profils expérimentaux. Néanmoins, les quantités d'acétaldéhyde sont à nouveau sous-estimées par le modèle quelle que soit la richesse du mélange.

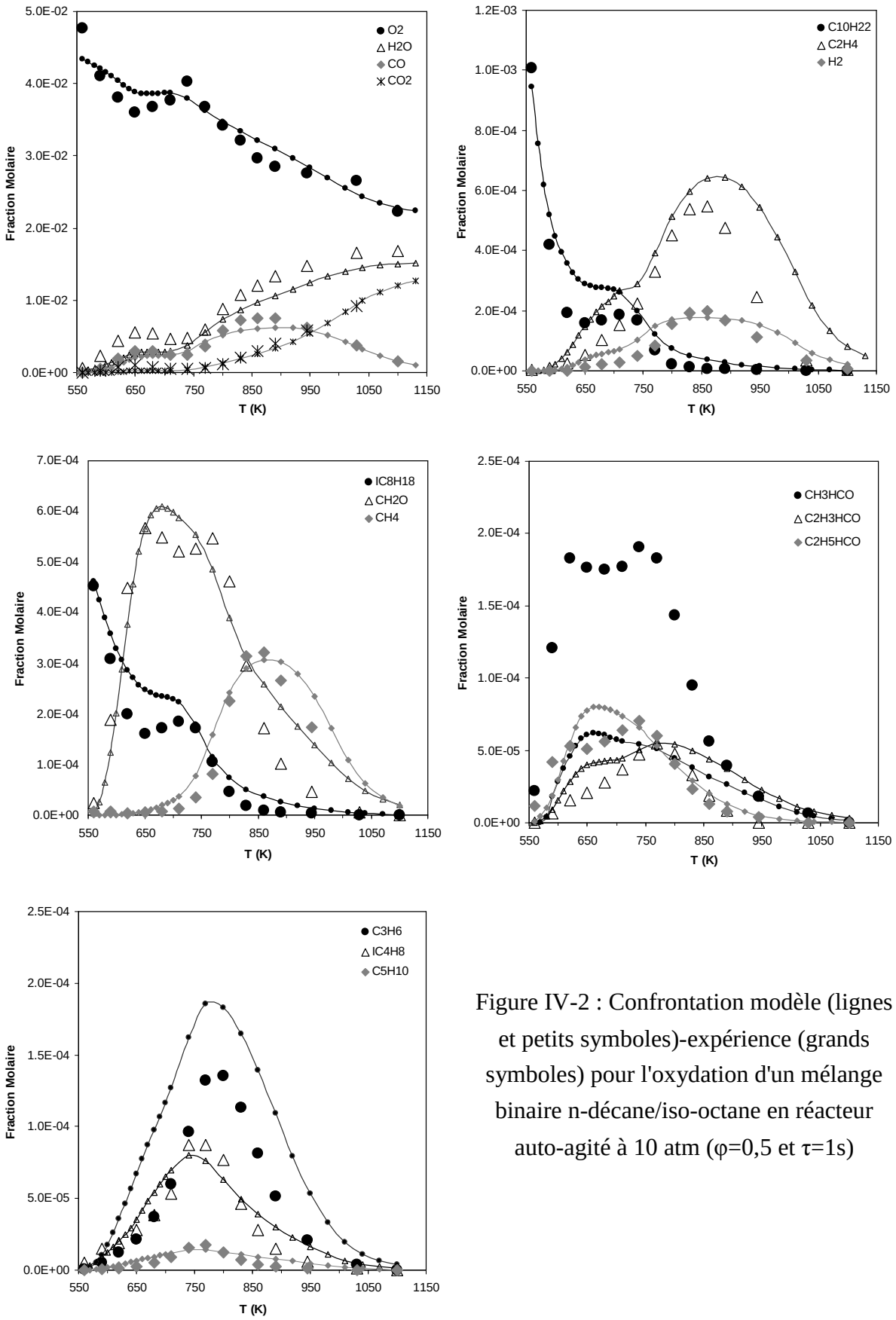



Figure IV-2 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation d'un mélange binaire n-décane/iso-octane en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=0,5 et τ=1s)

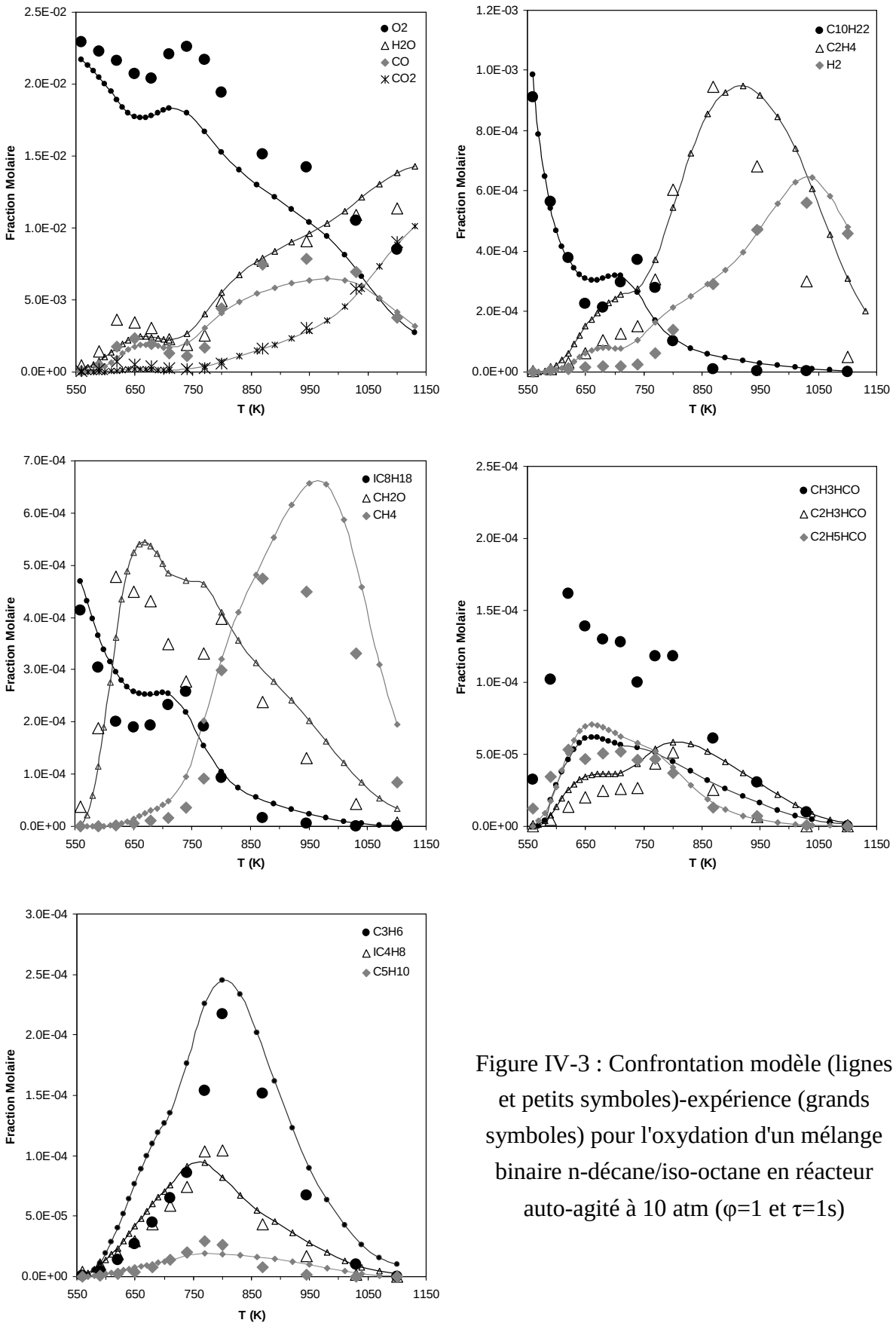



Figure IV-3 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation d'un mélange binaire n-décane/iso-octane en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=1 et τ=1s)

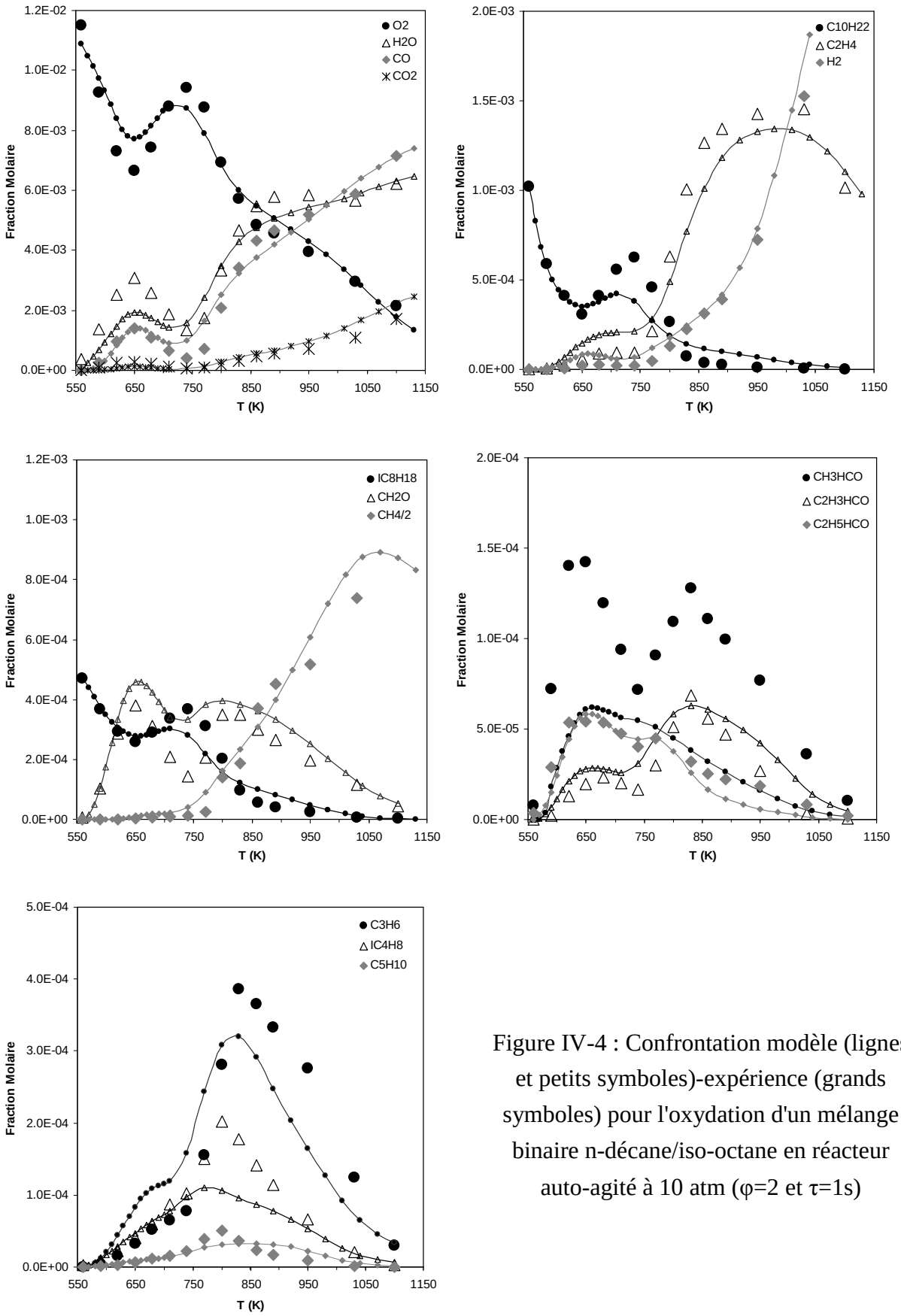



Figure IV-4 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation d'un mélange binaire n-décane/iso-octane en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=2 et τ=1s)

# 4. Étude de l'oxydation de mélanges ternaires

## 4.1 Protocole expérimental

Nous avons ensuite étudié l'oxydation de deux mélanges ternaires n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle en réacteur auto-agité. Le premier, contenant 67 % mol. de n-décane, 28 % mol. d'iso-octane et 5 % mol. d'octanoate de méthyle est représentatif d'un mélange de biocarburants contenant 90 % vol. de GtL et 10 % vol. d'EMHC. Il permet d'étudier l'impact d'un petit volume d'ester méthylique sur la réactivité et les émissions d'un carburant diesel alternatif. Le second mélange contenant 57 % mol. de n-décane, 13 % mol. d'iso-octane et 30 % mol. d'octanoate de méthyle est représentatif d'un mélange de biocarburant contenant 60 % vol. de GtL et 40 % vol. d'EMHC. Son étude permet d'obtenir des informations sur la combustion de mélanges alcane/ester méthylique avec une quantité importante d'ester.

Comme l'indique le Tableau IV-3, l'oxydation de ces deux mélanges a été étudiée à 10 atm, pour trois richesses différentes (0,5 ; 1 et 2) sur une large gamme de température (560-1160 K) et pour un temps de passage de 1 s.

Tableau IV-3 : conditions expérimentales d'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle en JSR

| Mélange | φ | Température (K) | Pression (atm) | Temps de passage (s) | Quantités initiales (ppm) | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | $C_{10}H_{22}$ | $iC_8H_{18}$ | $C_9H_{18}O_2$ | $O_2$ |
| GtL90B10 | 0,5 | 560-1100 | 10 | 1 | 666 | 284 | 50 | 27240 |
| | 1 | 560-1100 | 10 | 1 | 666 | 284 | 50 | 13620 |
| | 2 | 560-1160 | 10 | 1 | 666 | 284 | 50 | 6810 |
| GtL60B40 | 0,5 | 560-1160 | 10 | 1 | 573 | 127 | 300 | 29040 |
| | 1 | 560-1160 | 10 | 1 | 573 | 127 | 300 | 14220 |
| | 2 | 560-1160 | 10 | 1 | 573 | 127 | 300 | 7110 |

## 4.2 Résultats expérimentaux et validation du mécanisme

Nous avons obtenus les profils d'espèces des réactifs, produits et principaux composés intermédiaires formés lors de l'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle. Ces profils expérimentaux sont comparés avec les prédictions du modèle sur les Figures IV-5 à IV-10.

Les produits majoritaires, détectés et identifiées lors de cette étude sont : le dioxyde de carbone ($CO_2$), le monoxyde de carbone (CO), l'eau ($H_2O$), l'hydrogène ($H_2$), le méthane ($CH_3$), l'éthylène ($C_2H_4$), l'acétylène ($C_2H_2$), le propène ($C_3H_6$), le butène ($C_4H_8$), l'iso-butène ($iC_4H_8$), le 1,3-butadiène ($C_4H_6$), le pentène ($C_5H_{10}$), l'hexène ($C_6H_{12}$) le formaldéhyde ($CH_2O$), l'acétaldéhyde ($CH_3HCO$), le propanal ($C_2H_5HCO$), l'acroléine ($C_2H_3HCO$), le

butanal ($C_3H_7HCO$), le méthanol ($CH_3OH$), l'acétone ($CH_3COCH_3$) et le 2-propenoate de méthyle (mp2d). Comme pour le mélange binaire précédent, nous n'avons identifié aucune espèce supplémentaire en quantité notable par rapport à l'oxydation des trois hydrocarbures constitutifs du mélange. Ceci tend également à montrer qu'il n'y a pas d'interaction forte entre les sous-mécanismes spécifiques des 3 réactifs initiaux, et que les interactions se font au travers des radicaux communs de faible taille.

### 4.2.1 Oxydation du mélange GtL90B10

A la stœchiométrie, la présence d'octanoate de méthyle dans le mélange ne bouleverse pas la réactivité du carburant (cf. Figure IV-6). Cela n'est pas étonnant puisque les réactivités de l'octanoate de méthyle et du n-décane sont proches. La comparaison entre les prédictions du modèle et les résultats expérimentaux montre que le schéma cinétique représente de manière satisfaisante l'oxydation des trois réactifs ainsi que la formation des produits majoritaires même si la concentration en méthane est surestimée à haute température.

En milieu pauvre, la réactivité à basse température est plus importante qu'à la stœchiométrie (cf. Figure IV-5). Cette augmentation de la réactivité est bien représentée par le modèle, tout comme la formation des principaux produits et intermédiaires stables.

En milieu riche, le manque d'oxygène entraine une réduction de la réactivité à basse température ainsi qu'une augmentation de l'amplitude du NTC (cf. Figure IV-7). De plus, l'oxydation du CO est décalée vers le domaine de haute température. Tous ces faits expérimentaux sont bien reproduits par le modèle. On peut toutefois noter que les fractions molaires d'acétaldéhyde sont sous-estimées par le modèle quelle que soit la richesse.

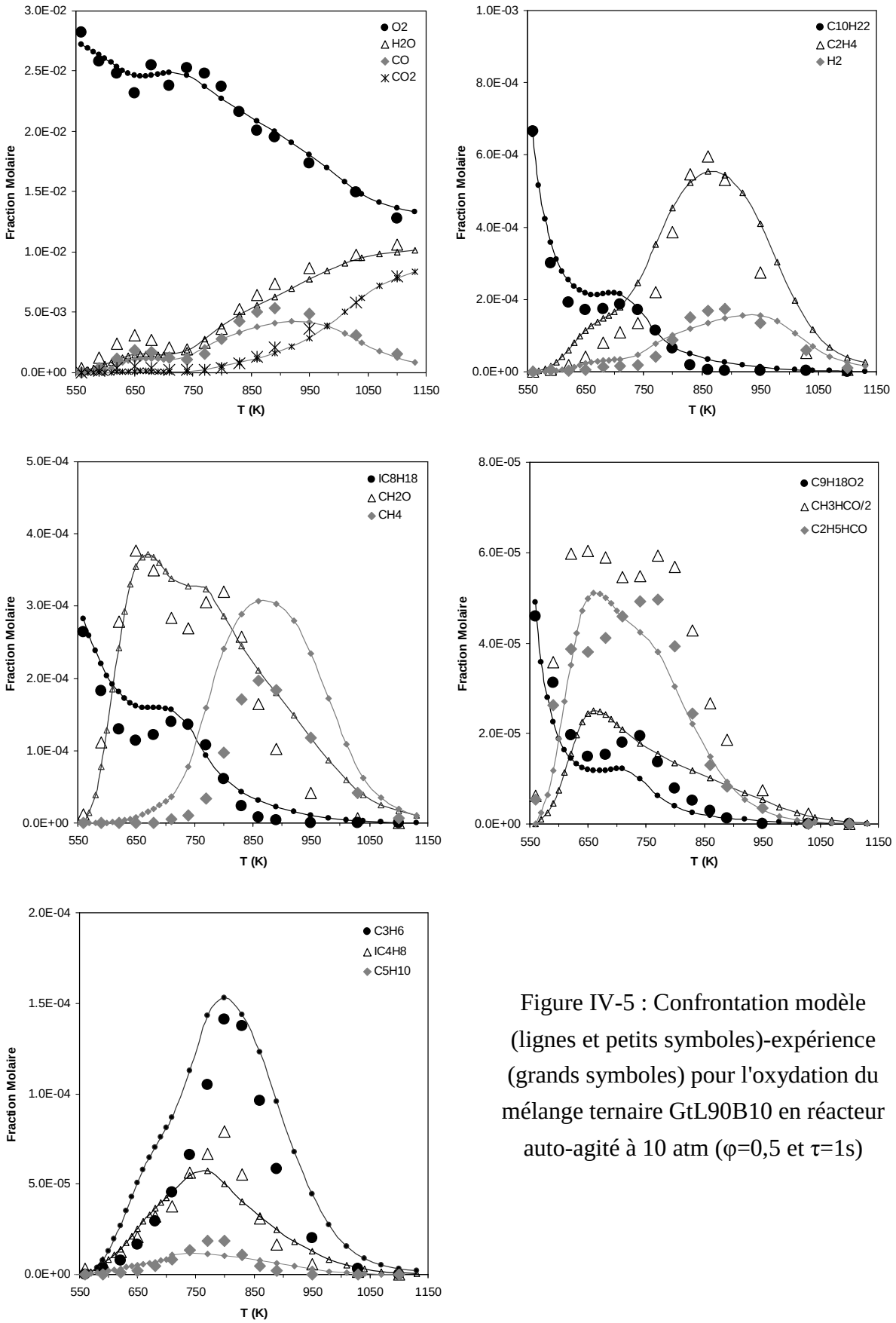



Figure IV-5 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange ternaire GtL90B10 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=0,5 et τ=1s)

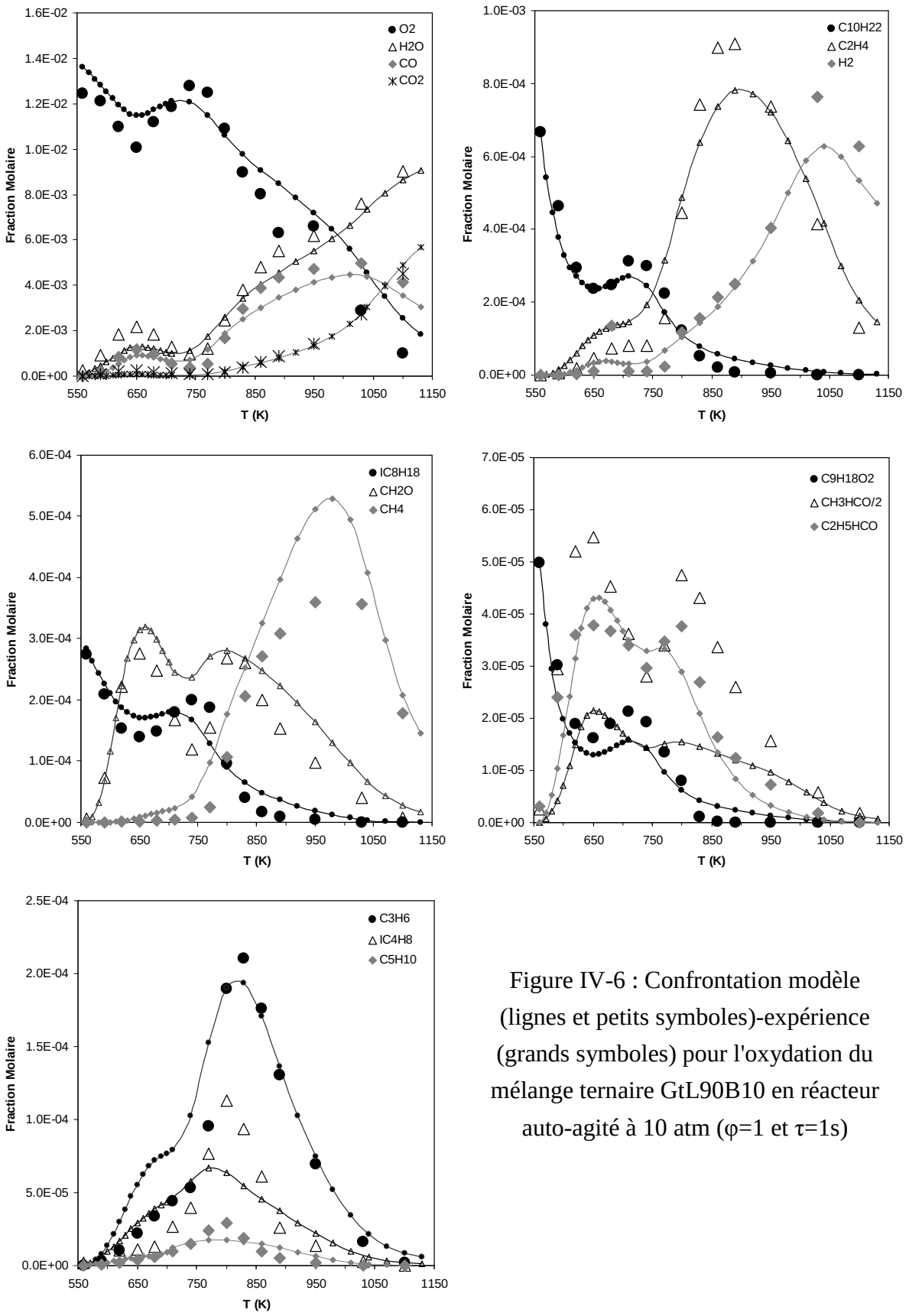



Figure IV-6 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange ternaire GtL90B10 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=1 et τ=1s)

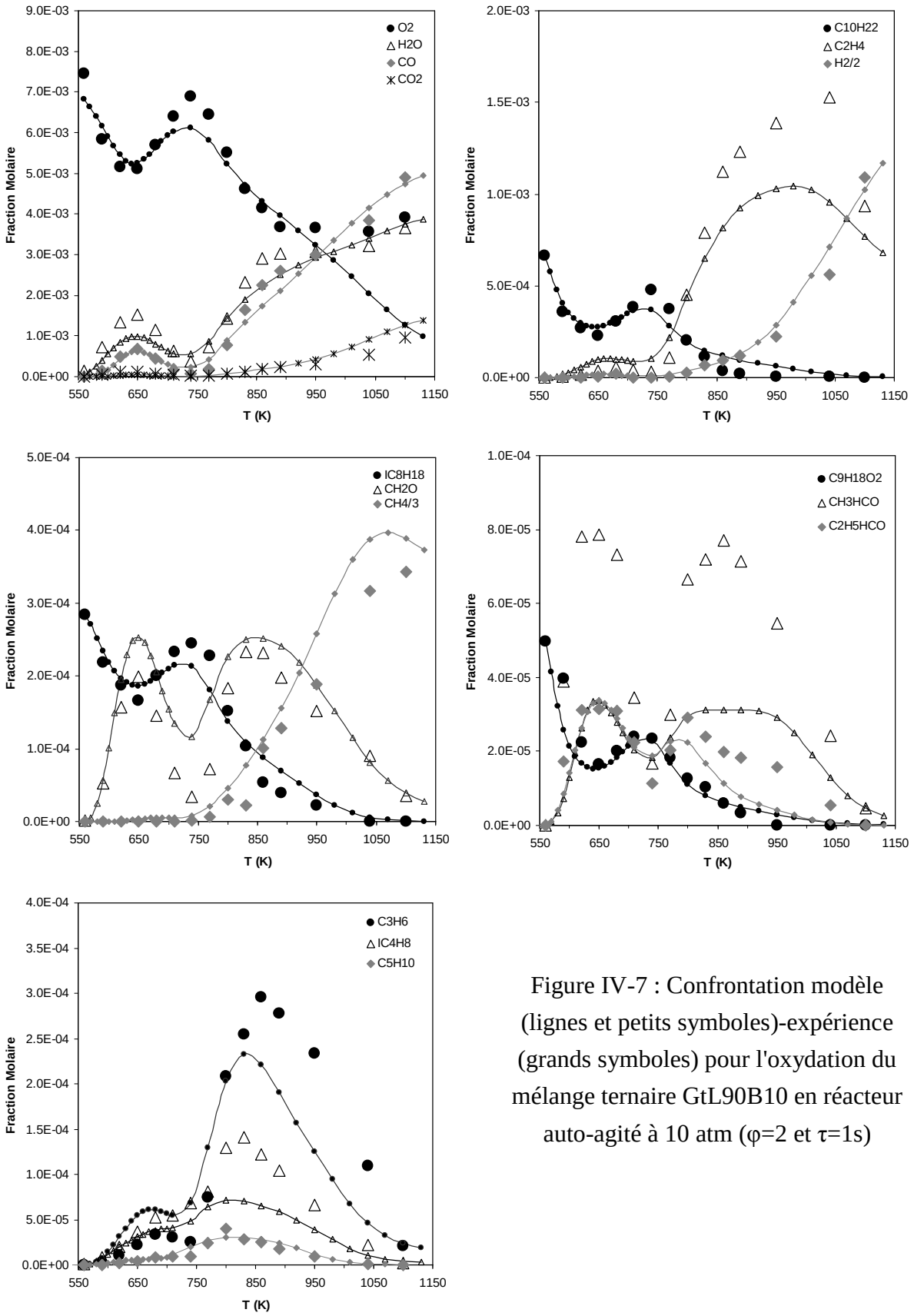



Figure IV-7 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange ternaire GtL90B10 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=2 et τ=1s)

### 4.2.2 Oxydation du mélange GtL40B60

La Figure IV-9 montre la confrontation entre les prédictions du modèle et les résultats expérimentaux pour l'oxydation du mélange GtL40B60 en réacteur auto-agité à la stœchiométrie. Le mécanisme cinétique représente de manière correcte la consommation des trois réactifs ainsi que la formation des principaux produits d'oxydation. Néanmoins, la concentration en acétaldéhyde est sous-estimée par le modèle dans ces conditions.

En milieu pauvre, l'augmentation de la réactivité se traduit par des concentrations plus importantes d'intermédiaires réactionnels à basse température ($CH_2O$, CO,…). Cette tendance est bien reproduite par le modèle tout comme les profils d'espèces majoritaires à l'exception de l'acétaldéhyde dont la concentration est à nouveau sous-estimée (cf. Figure IV-8).

La Figure IV-10 représente les résultats expérimentaux et les prédictions du mécanisme cinétique obtenus lors de l'oxydation du mélange GtL40B60 en réacteur auto-agité en milieu riche. Les prédictions du modèle sont en accord avec les résultats expérimentaux concernant l'oxydation des réactifs et la formations des produits majoritaires et des principaux intermédiaires d'oxydation. Les principaux désaccords entre la modélisation cinétique et les résultats expérimentaux concernent les concentrations d'acétaldéhyde et d'éthylène qui sont sous-estimés par le modèle.

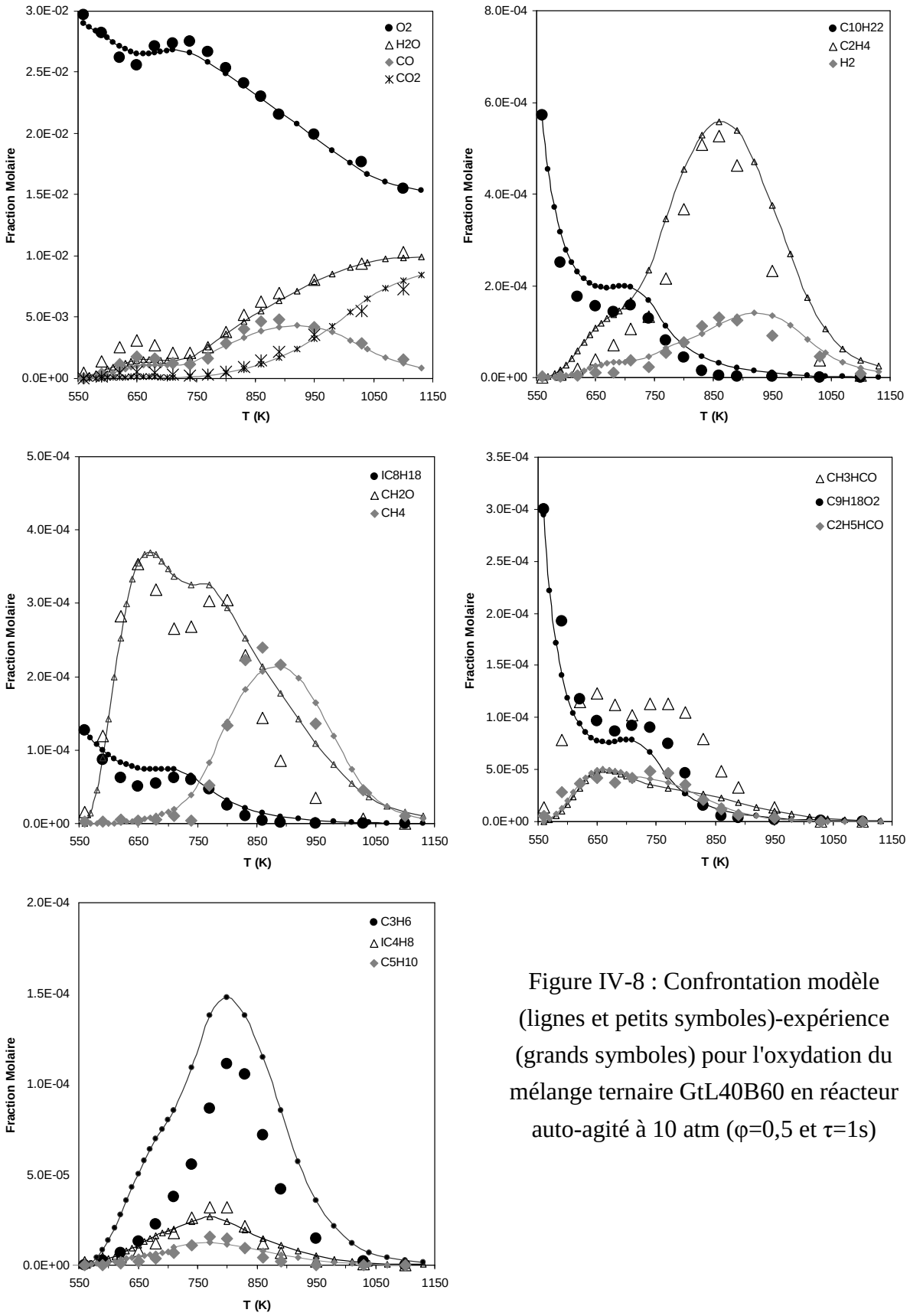



Figure IV-8 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange ternaire GtL40B60 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=0,5 et τ=1s)

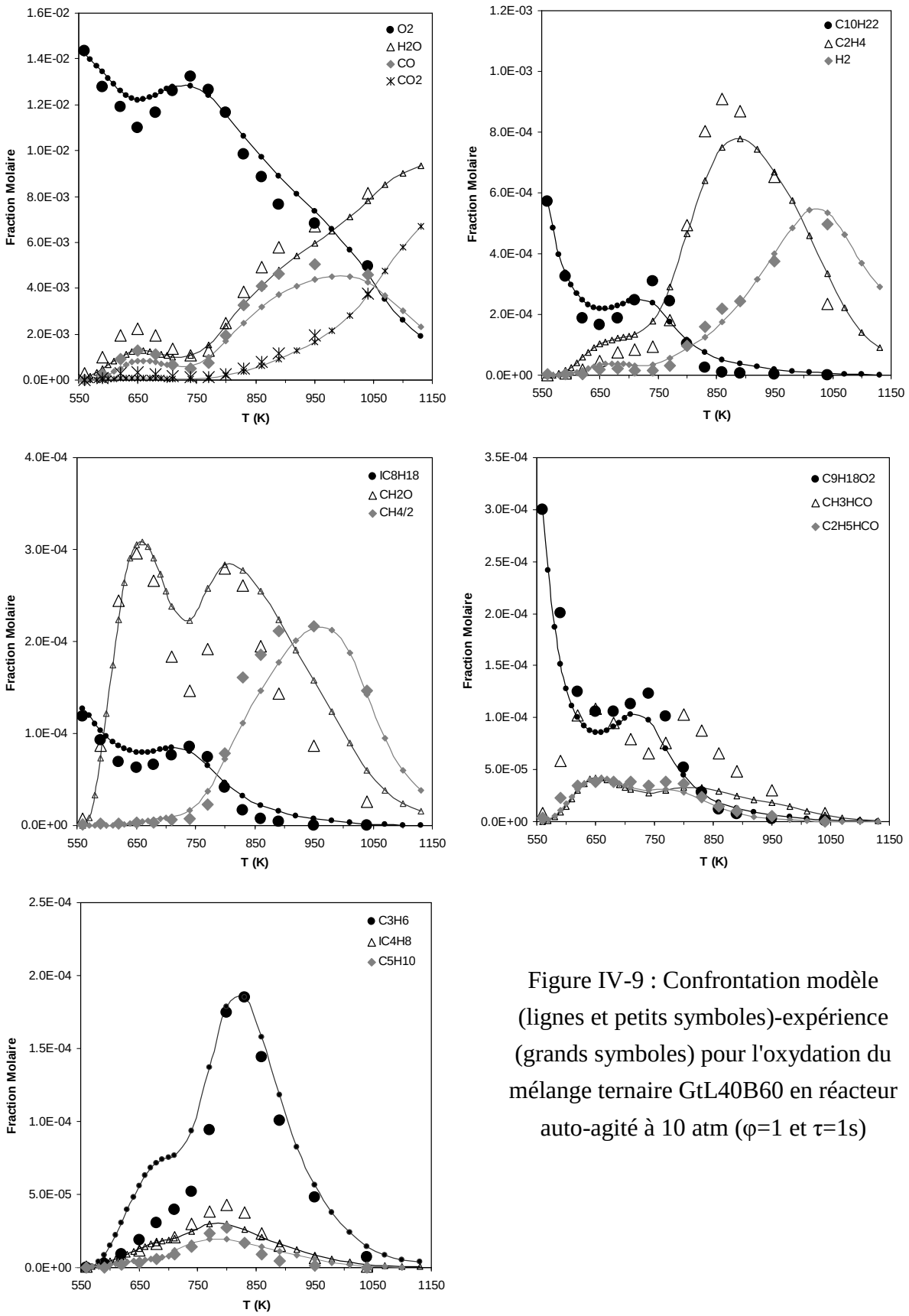



Figure IV-9 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange ternaire GtL40B60 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=1 et τ=1s)

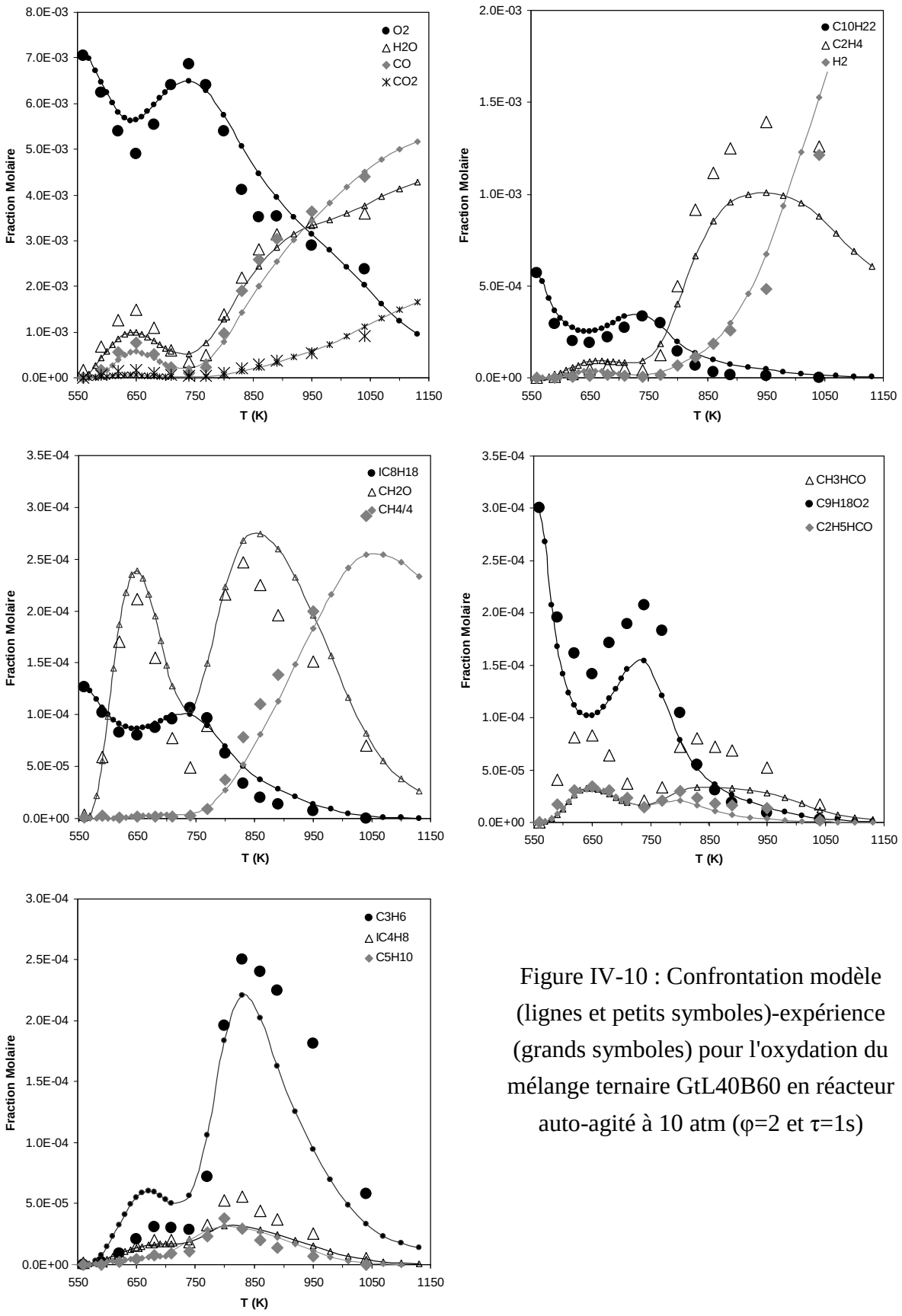



Figure IV-10 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange ternaire GtL40B60 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=2 et τ=1s)

## 4.3 Analyse de voies réactionnelles et de sensibilité

Après avoir observé que le modèle reproduisait de manière convenable l'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle en réacteur auto-agité, nous avons effectué une analyse de sensibilité pour déterminer les réactions les plus influentes ainsi qu'une analyse des voies réactionnelles afin de déterminer les chemins de dégradation préférentiels des réactifs initiaux. Ces analyses ont été menées pour le carburant modèle GtL40B60 à la stœchiométrie pour trois températures : 650 K, 750 K et 1050 K. Ces conditions ont été choisies afin d'identifier les réactions prépondérantes pour l'oxydation des hydrocarbures respectivement à basse température, dans le NTC et à haute température.

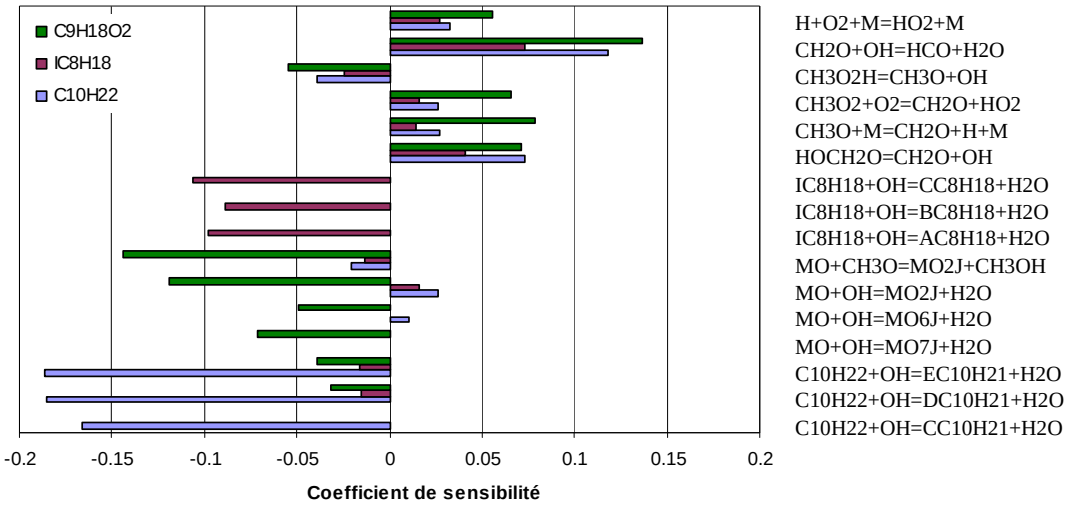



Figure IV-11 : Analyse de sensibilité pour le mélange GtL40B60 à 650 K, φ=1 et P=10 atm.

La Figure IV-11 présente les résultats de l'analyse de sensibilité pour les constituants du carburant modèle GtL40B60 à la stœchiométrie et pour une température de 650 K. Dans ces conditions, les profils de concentration des hydrocarbures constitutifs du mélange GtL40B60 sont très sensibles aux réactions de méthathèse avec les radicaux hydroxyles. Ces réactions favorisent la consommation des hydrocarbures initiaux et entrainent la formation de radicaux alkyles très réactifs. A cette température, la réaction IV-1 présente un coefficient de sensibilité positif. En effet, le formaldéhyde est un intermédiaire majoritaire qui consomme une quantité importante des radicaux OH au détriment du n-décane, de l'iso-octane et de l'octanoate de méthyle, entrainant une baisse de la réactivité.

$$CH_2O + OH = HCO + H_2O \qquad \text{(R IV-1)}$$

Les voies de dégradation du carburant modèle GtL40B60 pour une température de 1050K et une richesse de 1 sont représentées sur la Figure IV-12. On observe que les trois hydrocarbures étudiés réagissent selon une cinétique à peu près équivalente à basse température. Les trois composés réagissent dans un premier temps avec le radical hydroxyle pour former des radicaux alkyles. Des réactions d'isomérisation redistribuent les produits

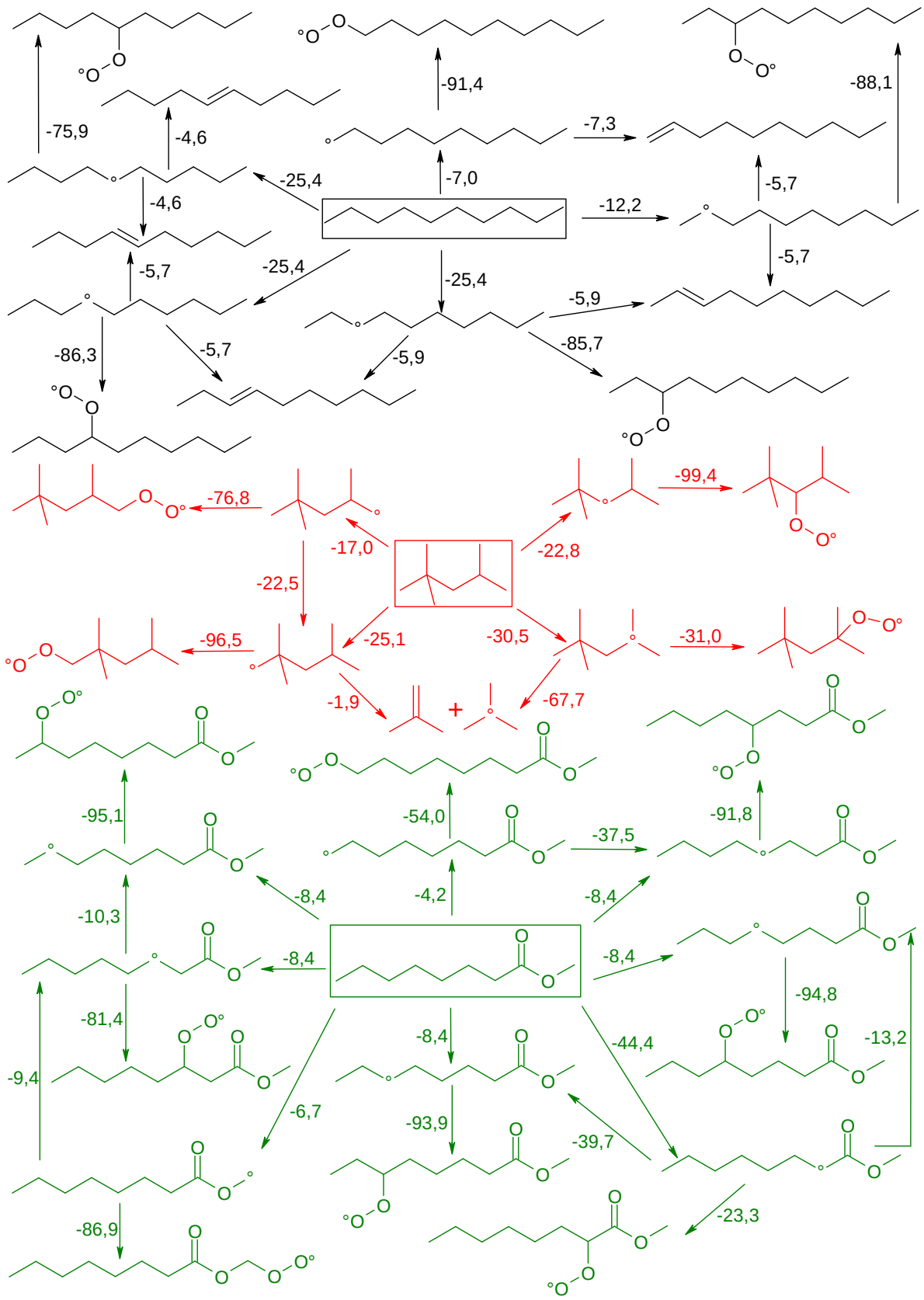



Figure IV-12 : Voies de dégradation principales du carburant modèle GtL40B60 (n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle) en réacteur auto-agité : φ=1, T=750 K, P=10 atm.

entre les différents isomères radicalaires. Par la suite ces radicaux additionnent l'oxygène pour former des radicaux peroxyalkyles ou bien s'oxydent pour former des alcènes. Néanmoins, à cette température, les réactions d'oxydation sont peu importantes face à l'addition d'oxygène.

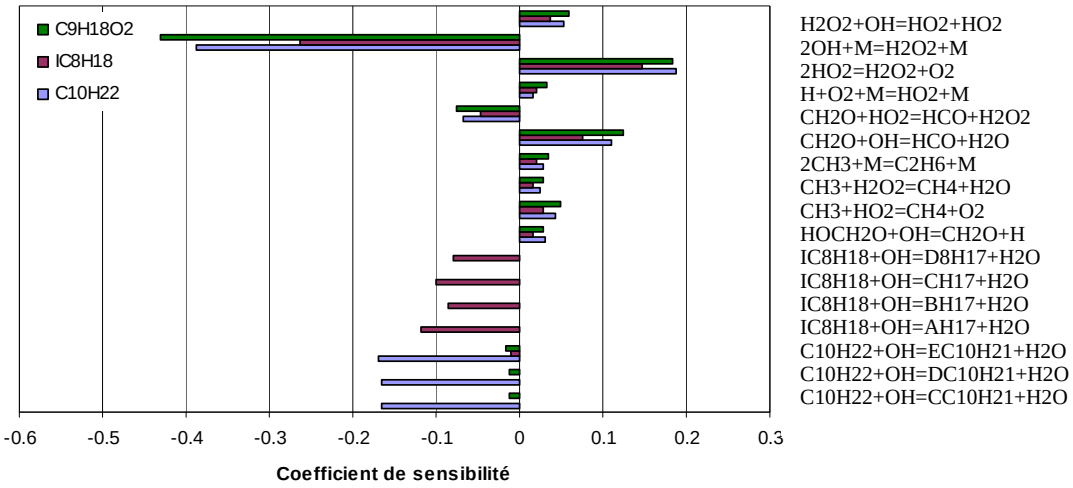



Figure IV-13 : Analyse de sensibilité pour le mélange GtL40B60 à 750 K, φ=1 et P=10 atm.

Grâce à notre modèle, nous avons pu mener une analyse de sensibilité à 750 K, où l'influence du NTC est la plus visible pour le mélange GtL40B60 à la stœchiométrie. La Figure IV-13 présente les réactions auxquelles les trois réactifs sont le plus sensible dans la zone de coefficient négatif de température. Dans ces conditions, la réaction de dismutation des hydroperoxydes pour former du peroxyde d'oxygène contribue fortement à l'inhibition de la réactivité globale du carburant (cf. réaction IV-2). A l'inverse, la réaction de dissociation du peroxyde d'hydrogène en deux radicaux hydroxyles a une très forte influence sur la consommation des 3 hydrocarbures initiaux (cf. réaction IV-3).

$$2HO_2 = H_2O_2 + O_2 \qquad \text{(R IV-2)}$$

$$H_2O_2 + M = 2OH + M \qquad \text{(R IV-3)}$$

La Figure IV-14 présente les principales voies de dégradation du n-décane, de l'iso-octane et de l'octanoate de méthyle lors de l'oxydation du carburant modèle GtL40B60 à la stœchiométrie pour une température de 750 K. Comme on peut le voir sur cette figure, les trois hydrocarbures étudiés subissent l'arrachage d'un atome d'hydrogène (principalement par OH mais aussi par d'autres petits radicaux) pour produire des radicaux alkyles. A cette température, l'addition d'oxygène sur ces radicaux primaires pour former des radicaux peroxydes reste la voie principale de décomposition des trois réactifs. Néanmoins, les réactions d'oxydation (aboutissant à la formation d'alcènes) et de décomposition voient leur importance augmenter par rapport à ce qui avait été observé à basse température.

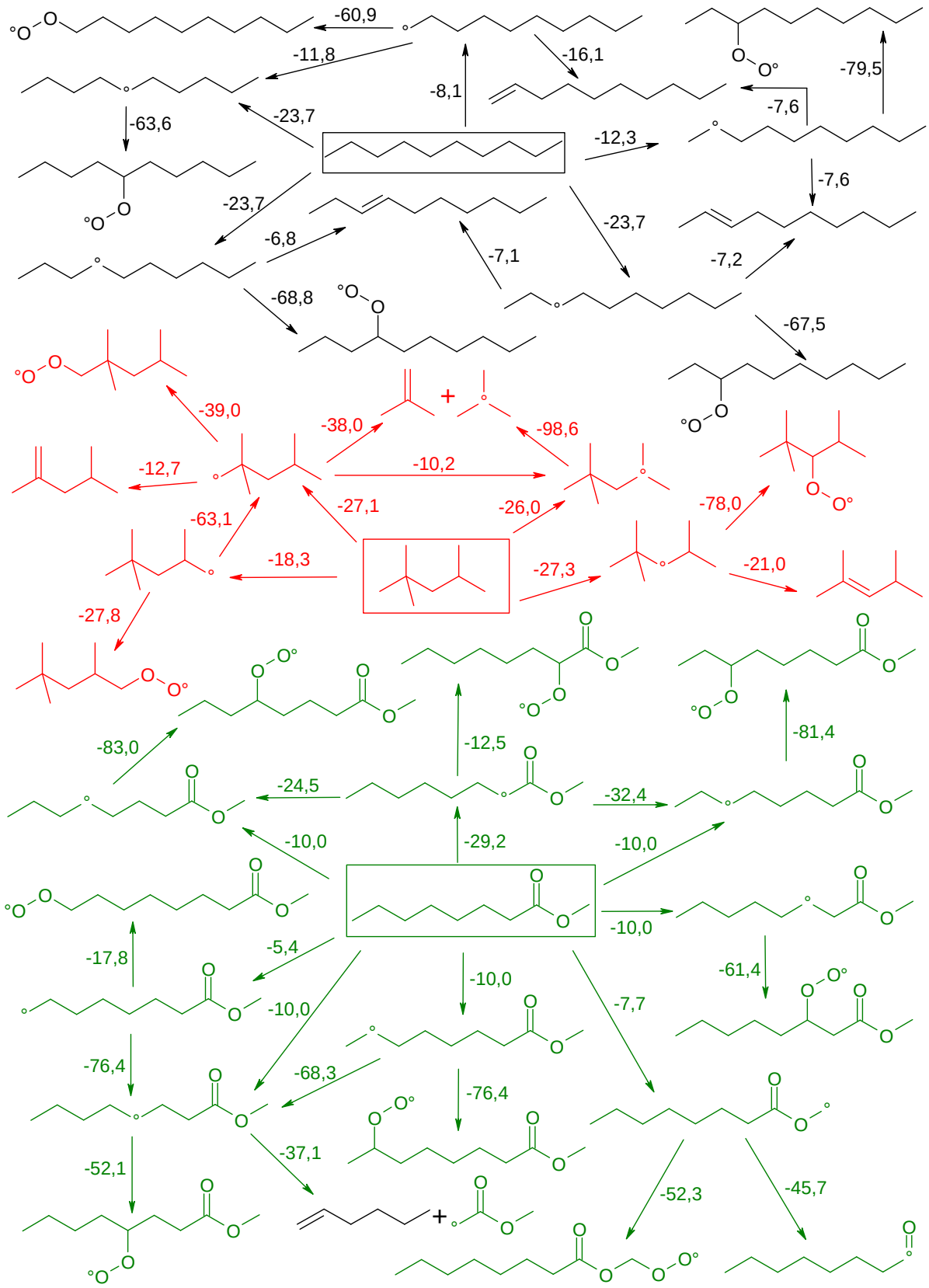



Figure IV-14 : Voies de dégradation principales du carburant modèle GtL40B60 (n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle) en réacteur auto-agité : φ=1, T=750 K, P=10 atm.

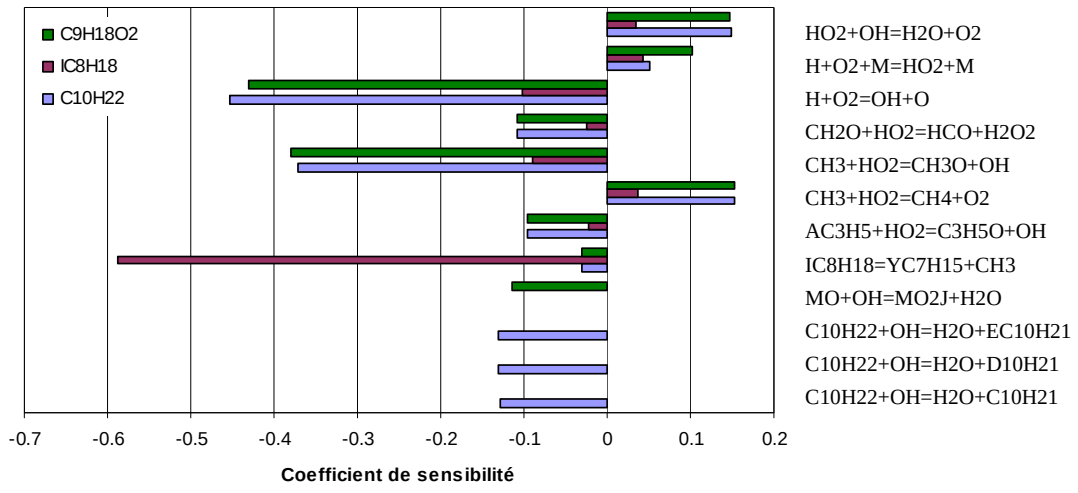



Figure IV-15 : Analyse de sensibilité pour le mélange GtL40B60 à 1050 K, φ=1 et P=10 atm.

La Figure IV-15 présente les coefficients de sensibilité les plus importants pour les trois hydrocarbures constitutifs du mélange GtL40B60 à 1050 K à la stœchiométrie. Parmi les réactions les plus influentes à cette température, on retrouve la cinétique associée au système C0-C2 responsable de l'emballement de la réaction (cf. réactions IV-4 à IV-6). On remarque également que la réactivité de l'iso-octane à haute température est fortement liée à une réaction de décomposition unimoléculaire (cf. réaction IV-7).

$$H + O_2 = OH + O \qquad \text{(R IV-4)}$$

$$CH_2O + HO_2 = HCO + H_2O_2 \qquad \text{(R IV-5)}$$

$$CH_3 + HO_2 = CH_3O + OH \qquad \text{(R IV-6)}$$

$$IC_8H_{18} = YC_7H_{15} + CH_3 \qquad \text{(R IV-7)}$$

Le schéma de dégradation du n-décane, de l'iso-octane et de l'octanoate de méthyle lors de l'oxydation du carburant modèle GtL40B60 à 1050 K est représenté sur la Figure IV-16. A cette température les trois hydrocarbures réagissent avec le radical OH pour former différents radicaux alkyles. Ces radicaux peuvent ensuite réagir selon trois voies. Ils peuvent s'isomériser pour donner un radical alkyle différent. La deuxième voie aboutit à la formation d'alcène par une réaction d'oxydation. Enfin, la voie de dégradation majoritaire dans ces conditions est la décomposition par β-scission pour former un alcène et un radical 1-alkyle.

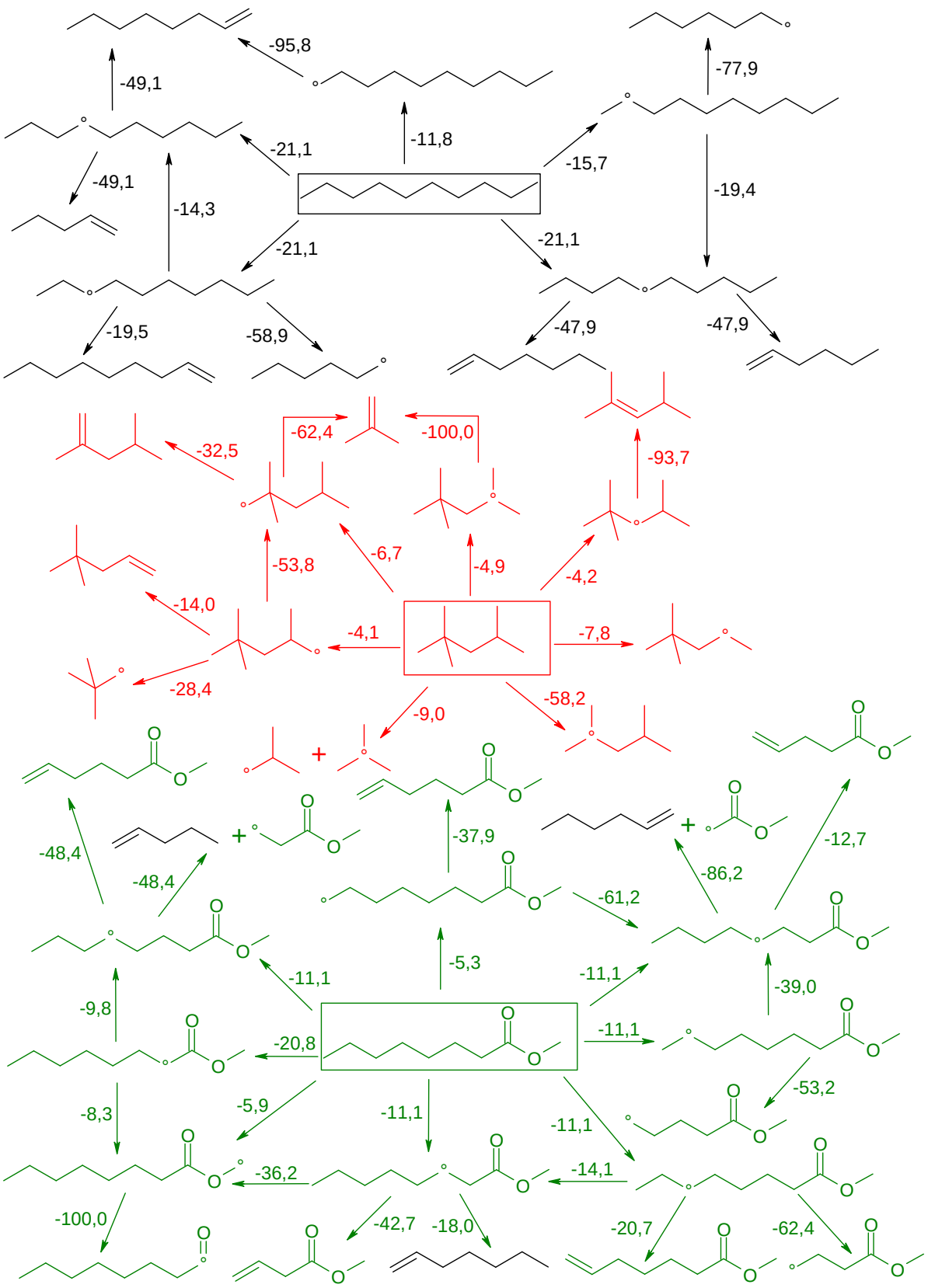



Figure IV-16 : Voies de dégradation principales du carburant modèle GtL40B60 (n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle) en réacteur auto-agité : φ=1, T=1050 K, P=10 atm.

# 5. Étude de l'oxydation de mélanges quaternaires

## 5.1 Protocole expérimental

Enfin, nous avons étudié l'oxydation de trois mélanges quaternaires n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol. Les fractions molaires de chacune des espèces modèle ont été calculées de façon à ce que les carburants modèle soient représentatifs de mélanges GtL/EMHC/éthanol avec respectivement 10, 20 et 30 % vol. d'éthanol. Dans chaque cas, le volume d'ester méthylique d'huile de colza et d'éthanol sont identiques afin d'éviter tout problème de démixtion.

Comme pour les cas précédents, les expériences ont été réalisées à 3 richesses (0,5 ; 1 et 2), pour une pression de 10 atm, avec un temps de passage fixé à 1 s et sur une gamme de température allant 560 à 1160 K. Tous les détails sur les conditions expérimentales étudiées sont regroupés dans le Tableau IV-4.

Tableau IV-4 : Conditions expérimentales d'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol en JSR

| Mélanges | φ | T (K) | P (atm) | τ (s) | Quantités initiales (ppm) | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | $C_{10}H_{22}$ | $iC_8H_{18}$ | $C_9H_{18}O_2$ | $C_2H_5OH$ | $O_2$ |
| GtL80B10E10 | 0,5 | 560-1100 | 10 | 1 | 491 | 207 | 41 | 261 | 22995 |
| | 1 | 560-1160 | 10 | 1 | 491 | 207 | 41 | 261 | 11498 |
| | 2 | 560-1160 | 10 | 1 | 491 | 207 | 41 | 261 | 5749 |
| GtL60B20E20 | 0,5 | 560-1160 | 10 | 1 | 355 | 132 | 69 | 443 | 18710 |
| | 1 | 560-1160 | 10 | 1 | 355 | 132 | 69 | 443 | 9355 |
| | 2 | 560-1160 | 10 | 1 | 355 | 132 | 69 | 443 | 4678 |
| GtL40B30E30 | 0,5 | 560-1160 | 10 | 1 | 256 | 76 | 90 | 578 | 15565 |
| | 1 | 560-1160 | 10 | 1 | 256 | 76 | 90 | 578 | 7783 |
| | 2 | 560-1160 | 10 | 1 | 256 | 76 | 90 | 578 | 3891 |

## 5.2 Résultats expérimentaux et validation du mécanisme

Nous avons obtenus les profils d'espèces des réactifs, produits et principaux composés intermédiaires formés lors de l'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol. Ces profils expérimentaux sont comparés avec les prédictions du modèle sur les Figures IV-17 à IV-25.

Les produits majoritaires, détectés et identifiées lors de cette étude sont : le dioxyde de carbone ($CO_2$), le monoxyde de carbone (CO), l'eau ($H_2O$), l'hydrogène ($H_2$), le méthane ($CH_3$), l'éthylène ($C_2H_4$), l'acétylène ($C_2H_2$), le propène ($C_3H_6$), le butène ($C_4H_8$), l'iso-butène ($iC_4H_8$), le 1,3-butadiène ($C_4H_6$), le pentène ($C_5H_{10}$), l'hexène ($C_6H_{12}$) le formaldéhyde ($CH_2O$), l'acétaldéhyde ($CH_3HCO$), le propanal ($C_2H_5HCO$), l'acroléine ($C_2H_3HCO$), le

butanal ($C_3H_7HCO$), le méthanol ($CH_3OH$), l'acétone ($CH_3COCH_3$) et le 2-propenoate de méthyle (mp2d). On peut remarquer que les produits majoritaires sont les mêmes que ceux observés au cours de l'oxydation des mélanges précédents. Comme lors de l'étude du mélange binaire et des deux mélanges ternaires nous n'avons observé aucune nouvelle espèce en quantité notable. Ceci nous indique que les sous mécanismes des 4 espèces modèles du mécanisme n'interagissent pas fortement tout en partageant néanmoins un 'pool' de petits radicaux ($C_0$-$C_4$).

### 5.2.1 Oxydation du mélange GtL80B10E10

A la stœchiométrie, les profils de concentration des 4 réactifs indiquent la présence d'une réactivité de basse température (cf. Figure IV-18). C'est un résultat intéressant puisque, dans des conditions similaires, l'éthanol pur ne réagit pas [201]. Ici, se sont les radicaux formés lors de l'oxydation des trois autres réactifs qui amorcent la consommation de l'éthanol. On peut aussi remarquer que la présence d'éthanol entraine une baisse de la réactivité à basse température par rapport aux mélanges binaires et ternaires étudiés précédemment. Cette diminution est due au captage d'une partie des radicaux hydroxyles (OH) par l'éthanol pour former des composés stables (acétaldéhyde, …). A basse température, l'arrachage d'un atome d'hydrogène du n-décane, de l'iso-octane ou de l'octanoate de méthyle par les radicaux OH contrôle la formation des radicaux alkyles qui, après addition sur $O_2$, sont impliqués dans des réactions de branchements générant une grande quantité de radicaux. La compétition entre l'éthanol et les trois autres réactifs pour le captage des radicaux hydroxyles entraine donc une diminution du pool radicalaire, ce qui a pour effet d'inhiber la réactivité de basse température. Le modèle reproduit de manière satisfaisante l'oxydation des quatre réactifs ainsi que la formation des produits principaux.

En milieu pauvre, la concentration plus importante en oxygène génère les mêmes effets que pour les mélanges binaires et ternaires précédemment étudiés : les réactifs subissent une oxydation plus importante à basse température et les composés intermédiaires sont produits en plus faible quantité. L'influence de la richesse est bien simulée par le mécanisme cinétique même si la réactivité de l'éthanol est sous-estimée pour les températures inférieures à 750 K (cf. Figure IV-17).

En milieu riche, on observe une diminution de la réactivité dans le domaine de basse température et une amplification du NTC. Cet effet était déjà observable pour les autres mélanges testés. Néanmoins, la présence d'éthanol amplifie ce phénomène. L'accord entre les prédictions du modèle et les résultats expérimentaux s'avère bon dans l'ensemble même si la quantité d'éthylène formée est sous estimée par le mécanisme à haute température (cf. figure IV-19).

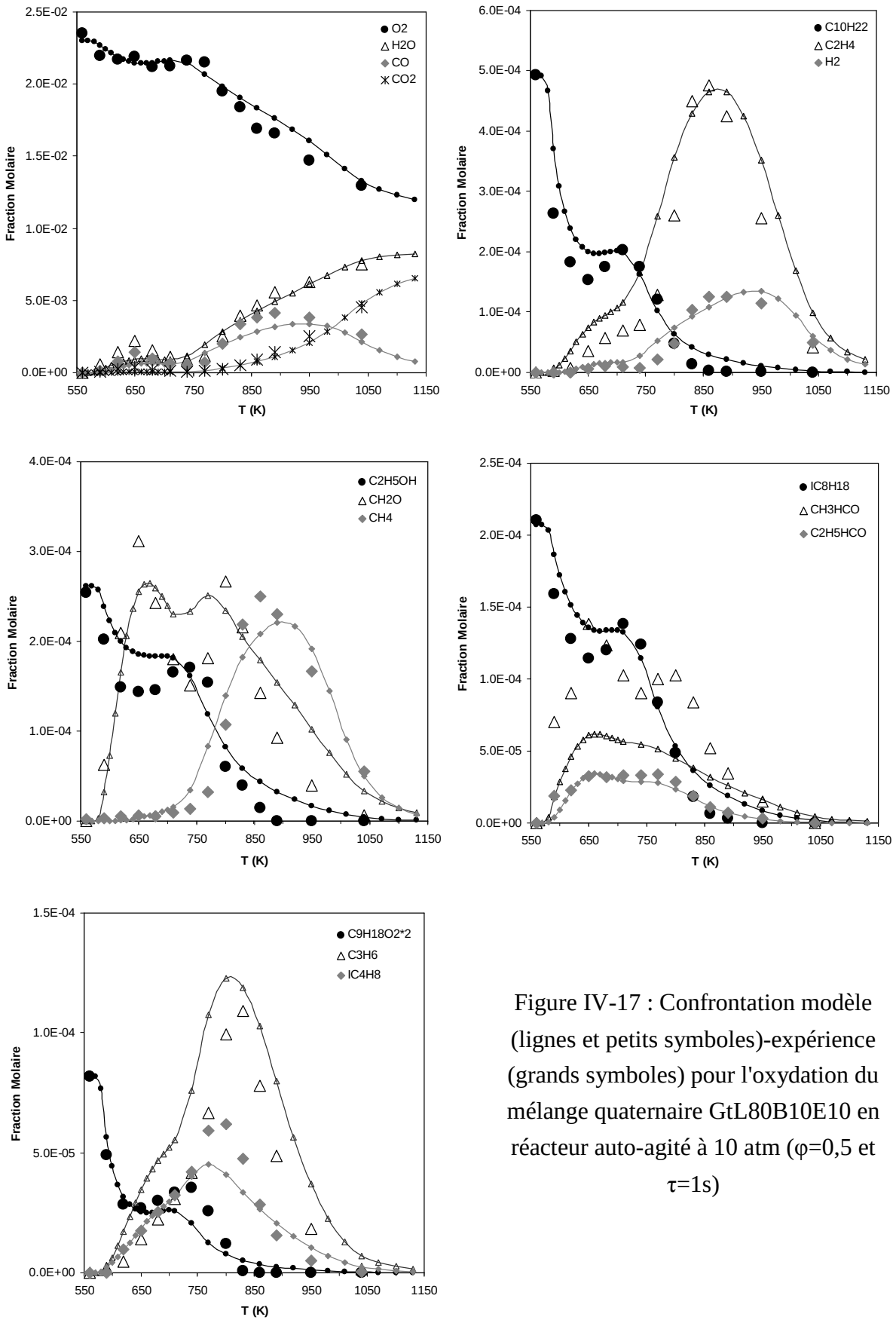



Figure IV-17 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL80B10E10 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=0,5 et τ=1s)

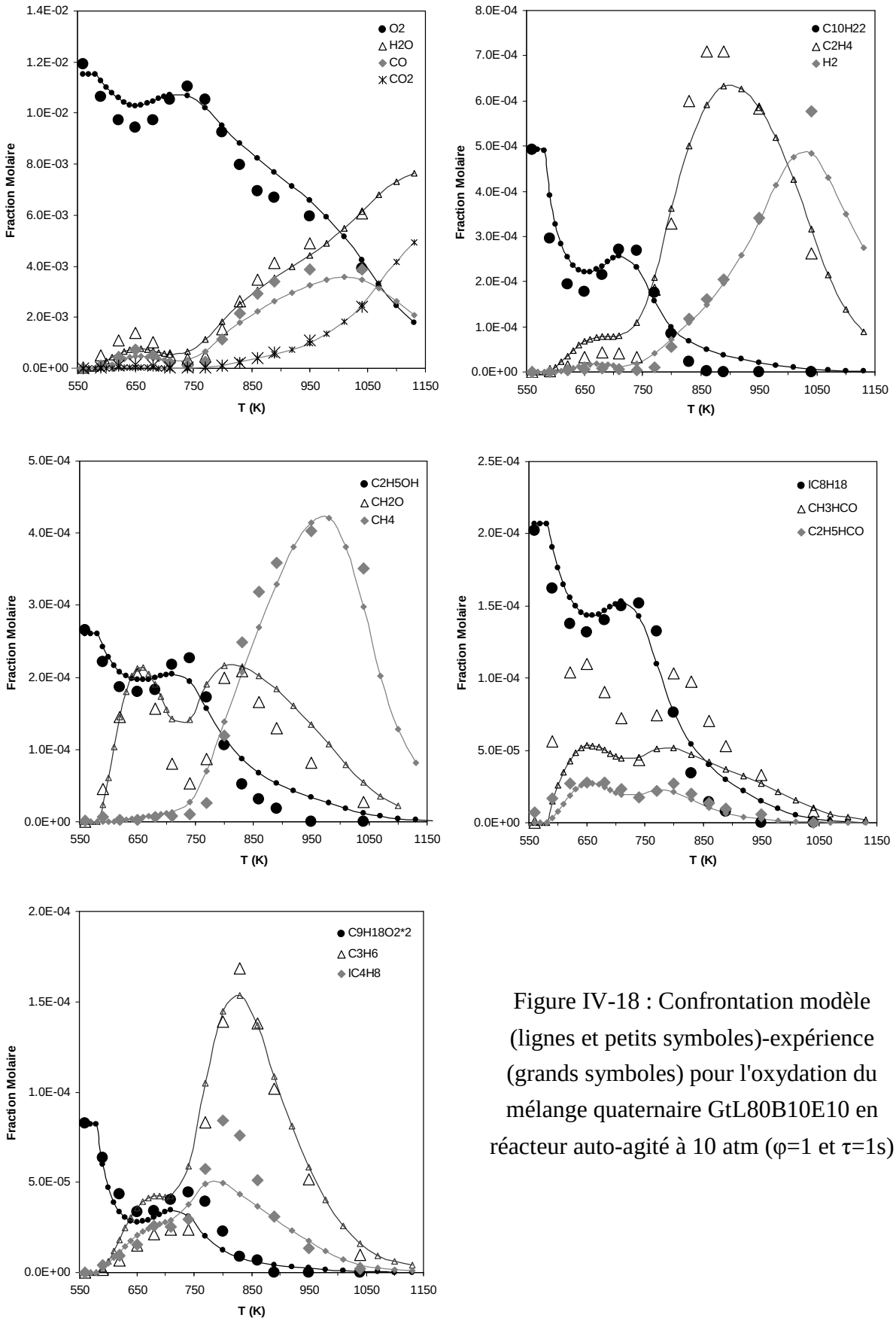



Figure IV-18 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL80B10E10 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=1 et τ=1s)

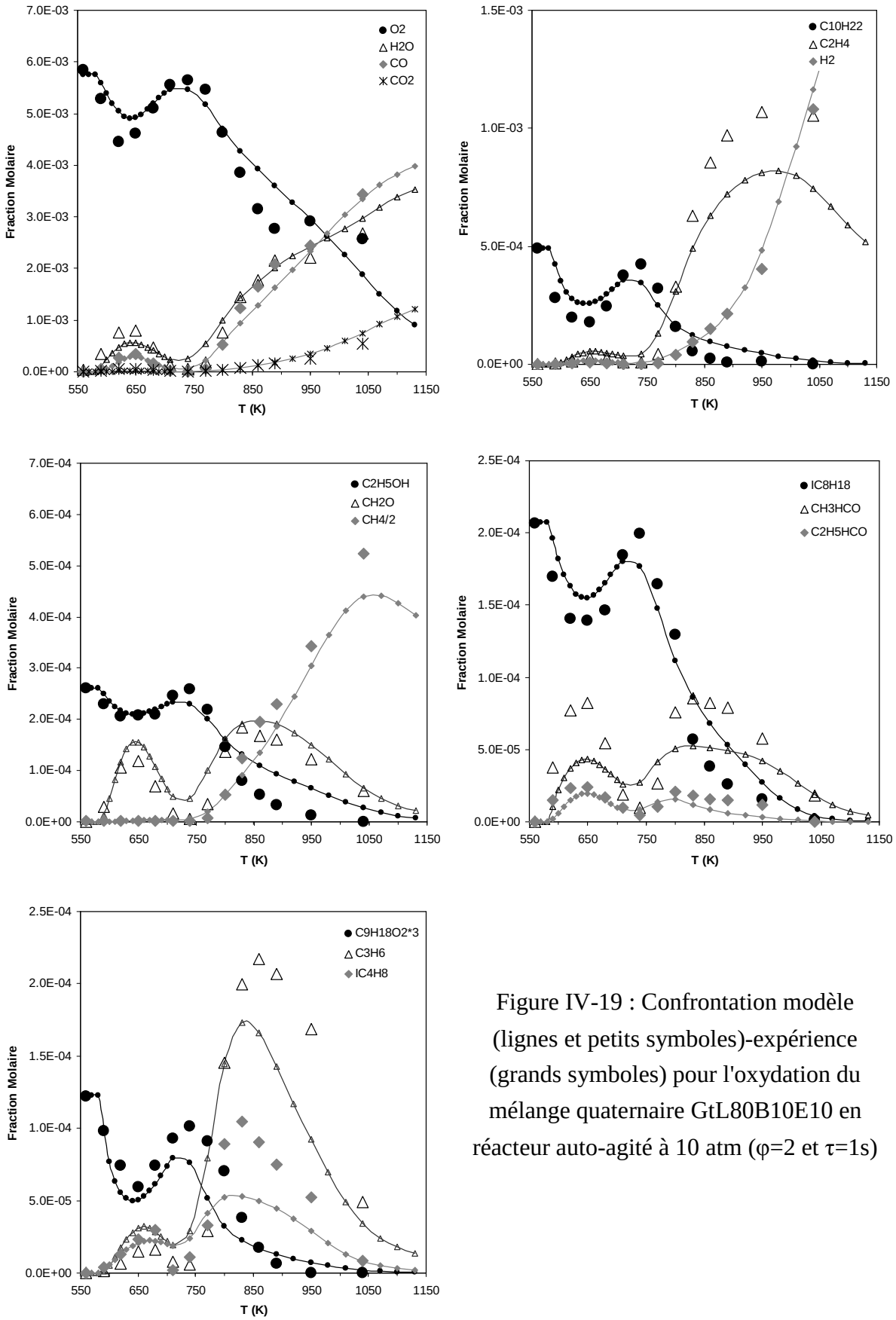



Figure IV-19 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL80B10E10 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=2 et τ=1s)

### 5.2.2 Oxydation du mélange GtL60B20E20

A la stœchiométrie, la présence de 20 % vol. d'éthanol dans le mélange réduit encore un peu plus la réactivité du carburant (cf. Figure IV-21). Les réactifs conservent néanmoins le comportement typique des alcanes linéaires (réactivité de basse température, NTC puis régime de haute température) même si l'oxydation des réactifs à basse température est moins importante que pour le mélange précédent. L'accord entre les prédictions du modèle et les résultats expérimentaux s'avère bon sauf pour l'acétaldéhyde dont la concentration est sous-estimée.

En milieu pauvre, le captage d'une partie des radicaux par l'éthanol au détriment du n-décane, de l'iso-octane et de l'octanoate de méthyle inhibe la réactivité globale du carburant. Cela se traduit par un coefficient négatif de température réduit pour l'ensemble des réactifs. Le schéma cinétique représente bien l'effet de la richesse sur la réactivité du carburant. L'oxydation des quatre réactifs ainsi que la formation des principaux produits sont bien reproduits par le modèle (cf. Figure IV-20).

En milieu riche, l'effet inhibiteur de l'éthanol est très visible (cf. Figure IV-22). Le profil de tous les réactifs montrent une légère oxydation à basse température suivie d'une zone de coefficient négatif de température intense. De plus, la conversion du CO est décalée vers le domaine de haute température. On observe un bon accord entre les prédictions du mécanisme quaternaire et les profils expérimentaux d'espèces, sauf pour le méthane et l'éthylène dont les concentrations sont sous-estimées à haute température.

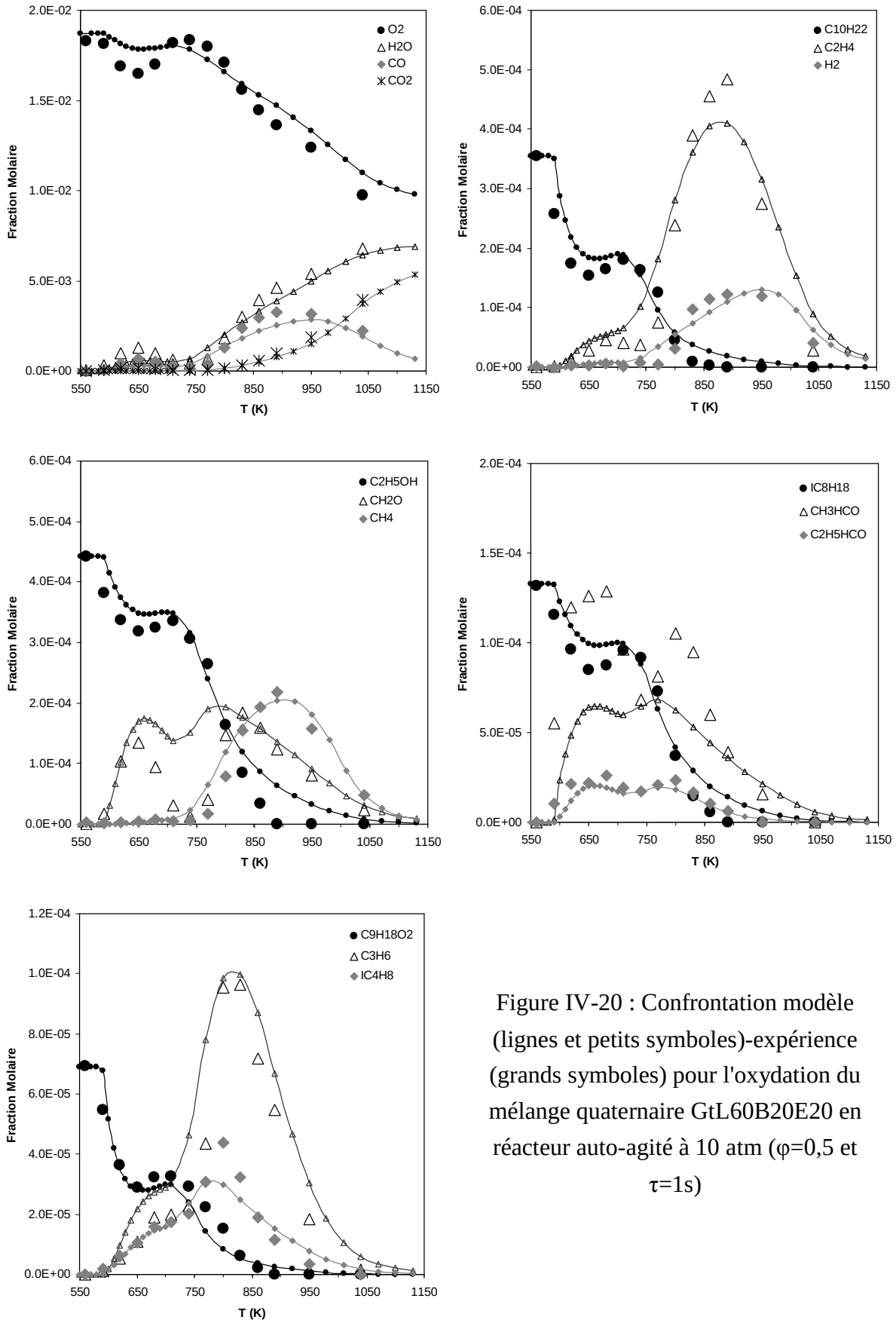



Figure IV-20 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL60B20E20 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=0,5 et τ=1s)

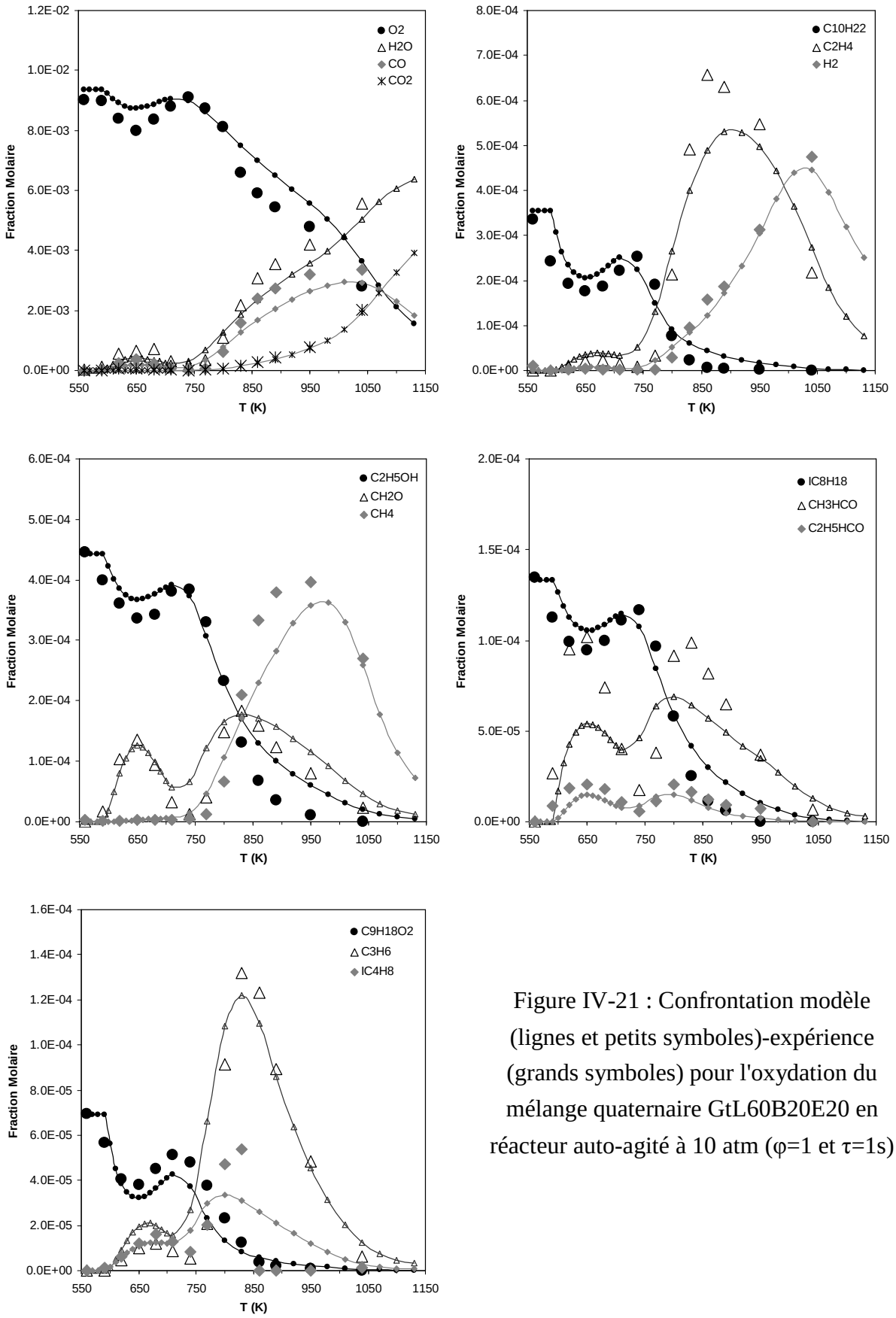
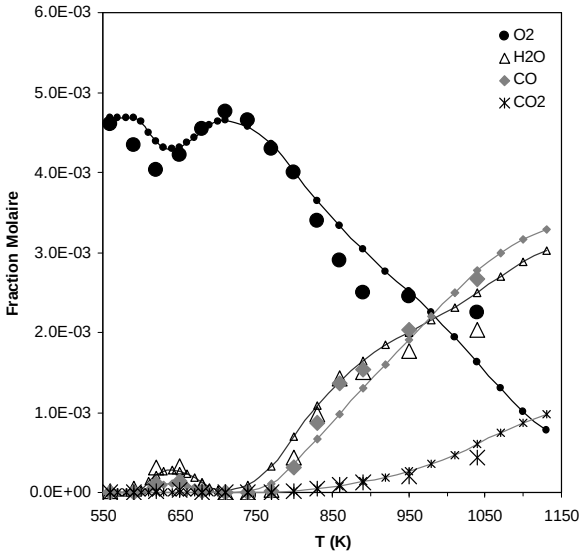
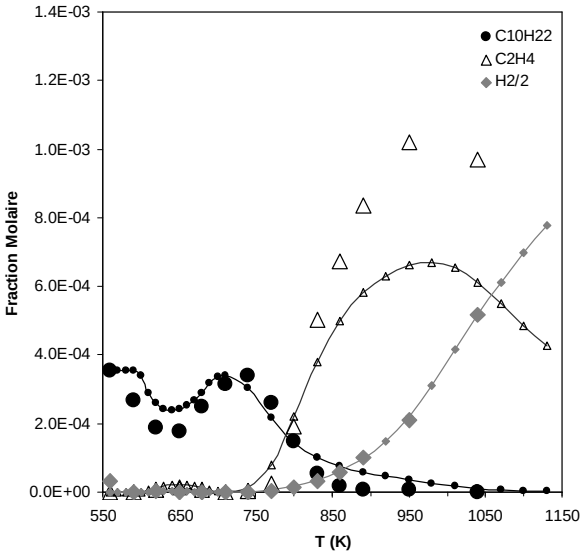
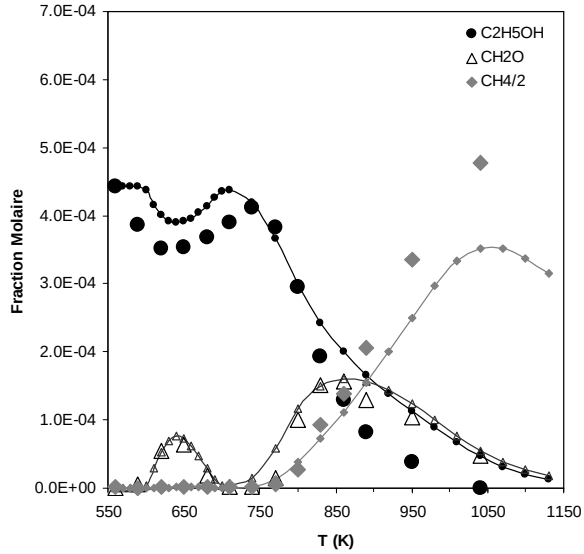
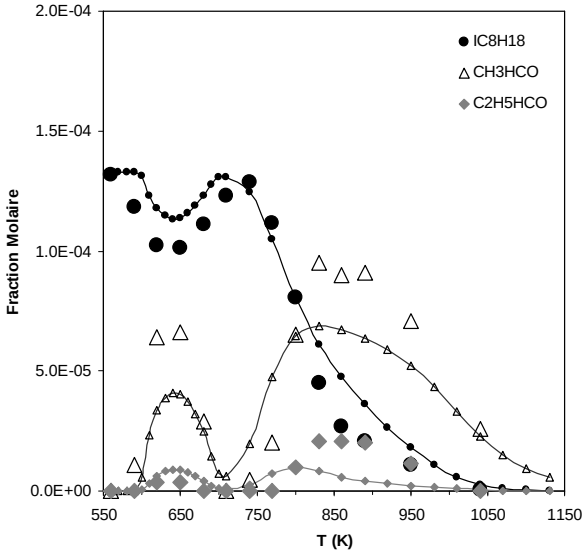



Figure IV-21 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL60B20E20 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=1 et τ=1s)



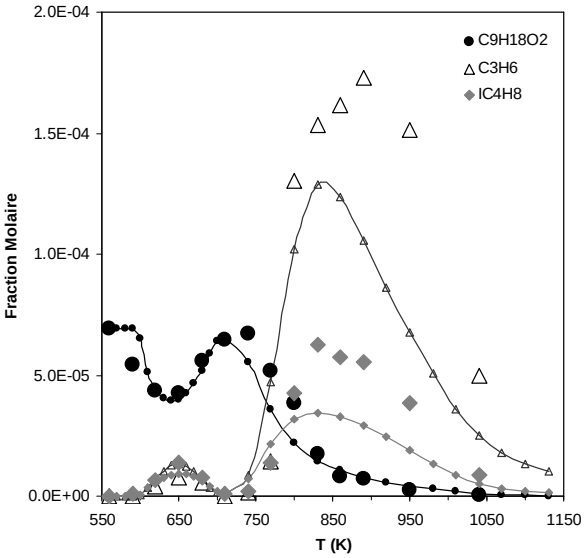




Figure IV-22 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL60B20E20 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=2 et τ=1s)

### 5.2.3 Oxydation du mélange GtL40B30E30

A la stœchiométrie, la présence de 30% vol. d'éthanol entraine une réduction importante de la réactivité de basse température (cf. Figure IV-24). Le modèle reproduit de manière très satisfaisante la diminutionde la réactivité ainsi que l'augmentation importante de la quantité d'acétaldéhyde dans ces conditions.

En milieu pauvre, la plus grande quantité d'oxygène disponible limite l'effet inhibiteur de l'éthanol (cf. Figure IV-23). La réactivité de basse température est néanmoins fortement réduite en comparaison avec les mélanges précédents. Les prédictions du modèle sont en bon accord avec les données expérimentales concernant la consommation des réactifs et la formation des produits majoritaires, même si la concentration en acétaldéhyde est sous-estimée.

C'est en milieu riche que l'impact de l'éthanol sur la réactivité est le plus visible (cf. Figure IV-25). En effet, à $\varphi$=2, la réactivité de basse température est fortement inhibée et tend à disparaitre. Le modèle reproduit bien l'effet inhibiteur de l'éthanol dans ces conditions ainsi que la formation des principaux produits d'oxydation même si la concentration d'éthylène est sous-estimée par le mécanisme à haute température.

## 5.3 Impact de l'éthanol sur la réactivité du mélange

Comme nous avons pu le voir sur les Figures précédentes la réactivité des mélanges semblent décroitre à mesure que la quantité d'éthanol augmente dans le mélange. Le décane étant l'espèce la plus réactive des quatre constituants du carburant modèle, c'est elle qui détermine la réactivité globale du mélange. Nous avons donc comparé les fractions molaires du n-décane lors de l'oxydation de trois mélanges en réacteur auto-agité à trois richesses différentes. Les fractions molaires de n-décane ont été normalisées (fraction molaire de n-décane/fraction molaire initiale de carbone présente dans le mélange) afin de permettre une comparaison entre les différents mélanges.

Comme on peut le voir sur la Figure IV-26, les profils de n-décane sont quasiment identiques pour les mélanges GtL et GtL40B60, quelle que soit la richesse. Cela démontre que l'ajout d'une quantité importante de biodiesel n'a qu'un impact restreint sur la réactivité du GtL. Cela peut s'expliquer facilement puisque le n-décane et l'octanoate de méthyle ont des réactivités comparables. L'ajout d'une grande quantité d'octanoate de méthyle n'a donc qu'un faible impact sur l'oxydation du n-décane. En revanche, la présence d'éthanol dans le mélange a une forte influence sur la réactivité du carburant. En milieu pauvre, l'oxydation du n-décane du mélange GtL80B10E10 est réduite sur tout le domaine de température. On observe également une diminution plus marquée de la réactivité dans la zone de coefficient négatif de température.

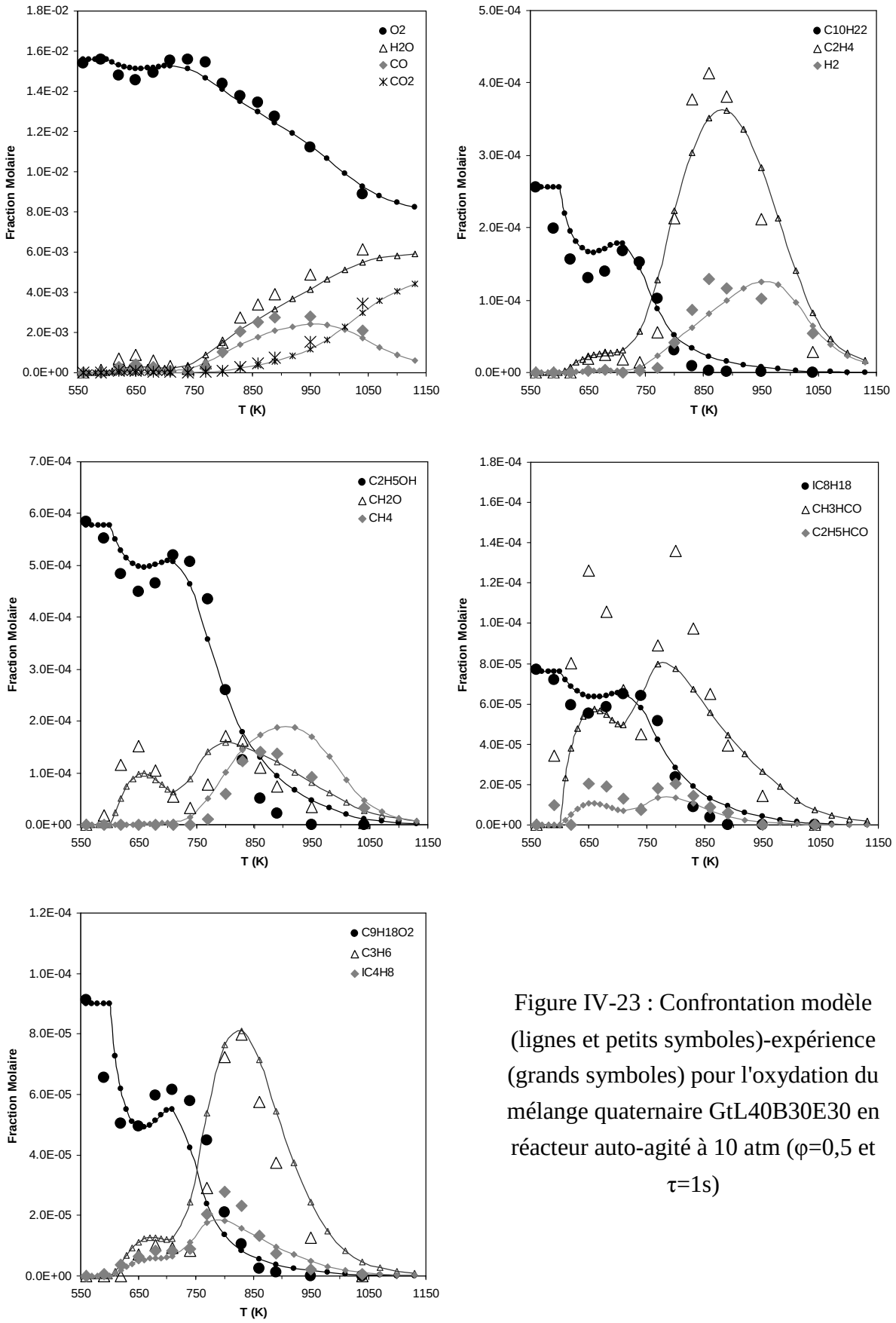



Figure IV-23 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL40B30E30 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=0,5 et τ=1s)

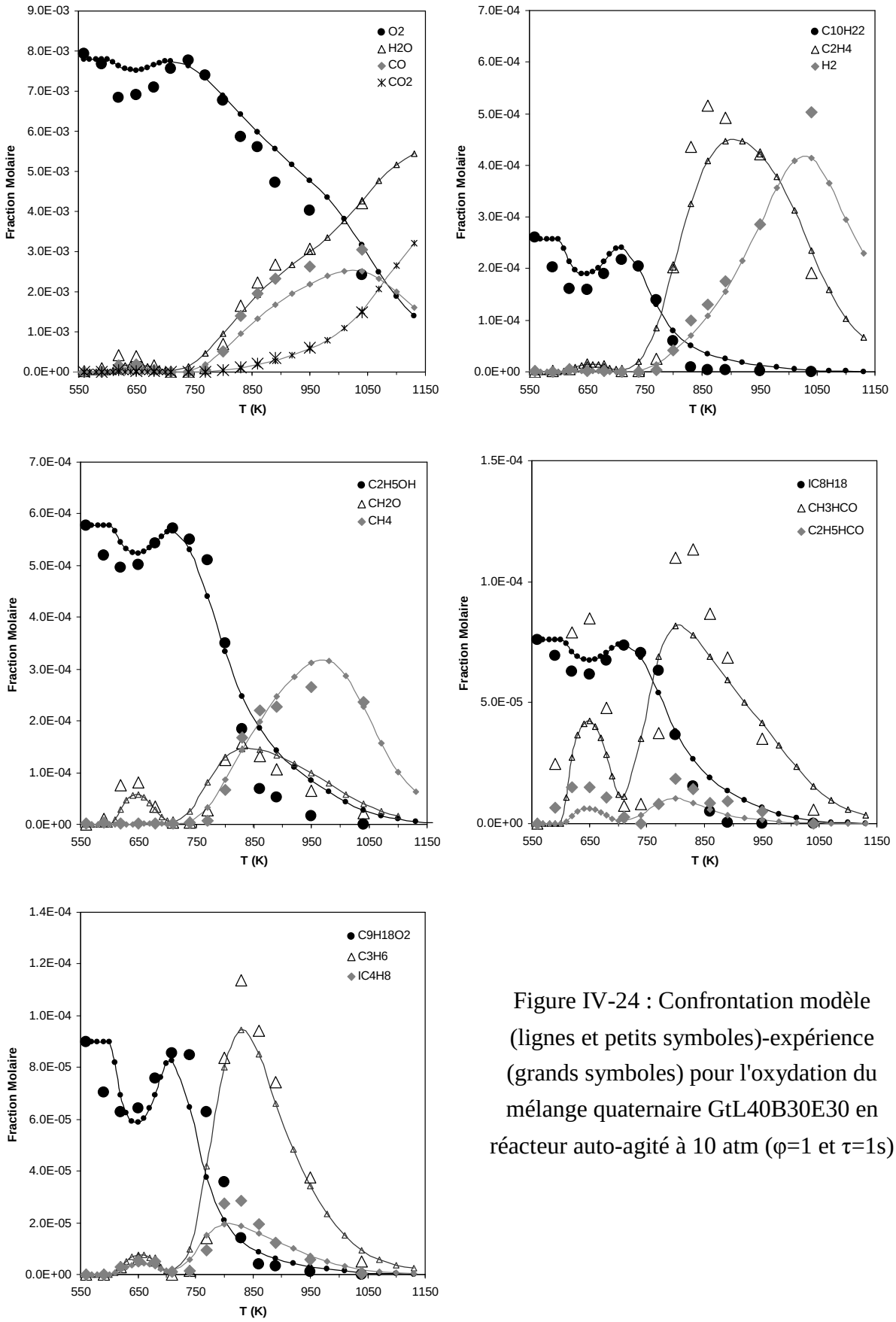



Figure IV-24 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL40B30E30 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=1 et τ=1s)

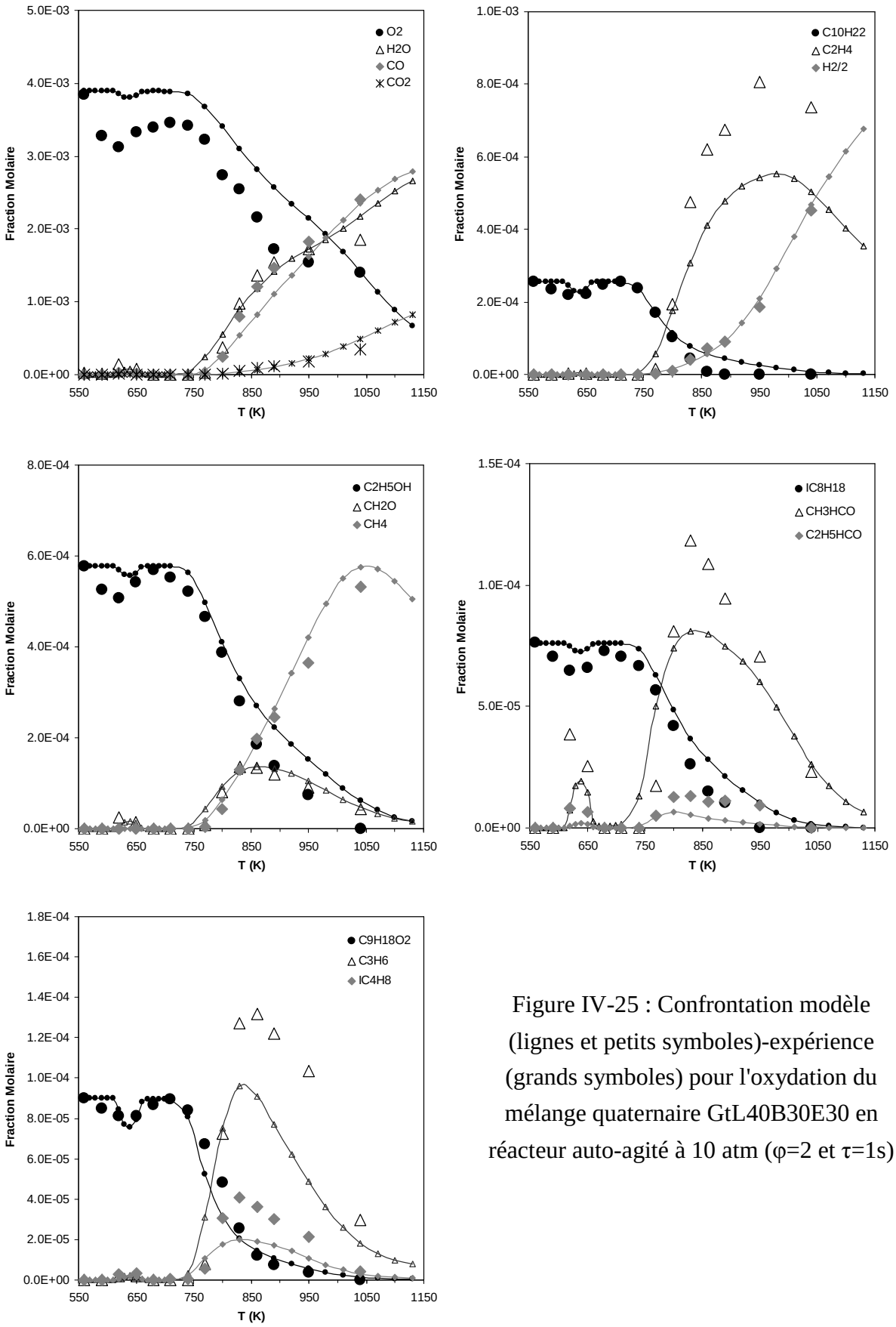



Figure IV-25 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) pour l'oxydation du mélange quaternaire GtL40B30E30 en réacteur auto-agité à 10 atm (φ=2 et τ=1s)

A la stœchiométrie, on observe également une légère augmentation de l'amplitude du NTC. Néanmoins, l'effet le plus marquant de l'éthanol sur la réactivité est visible en milieu riche. Dans ces conditions, on observe une inhibition importante de la réactivité du n-décane dans la zone de NTC par rapport aux deux autres mélanges

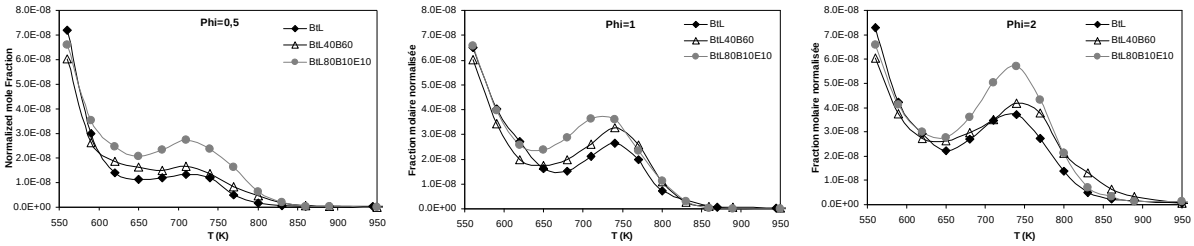



Figure IV-26 : Fraction molaire normalisée de n-décane durant l'oxydation des mélanges GtL, GtL40B60 et GtL80B10E10 en JSR

Afin de comprendre l'influence de l'éthanol sur la réactivité dans la zone de NTC en milieu riche, où l'influence de l'éthanol est la plus marquée, nous avons réalisé une analyse de voies réactionnelles pour les mélanges GtL et GtL80B10E10 pour une pression de 10 atm, une richesse de 2 et une température de 740 K. Les principales voies réactionnelles du n-décane pour ces deux mélanges sont présentées sur la Figure IV-27. Les taux de productions présentés dans ce schéma ont été normalisés en divisant le taux de production de chaque espèce par la vitesse de consommation du n-décane ($1{,}05 \times 10^{-7}$ mol.cm$^3$.s$^{-1}$ pour le GtL et $2{,}42\times 10^{-8}$ mol.cm$^3$.s$^{-1}$ pour le GtL80B10E10).

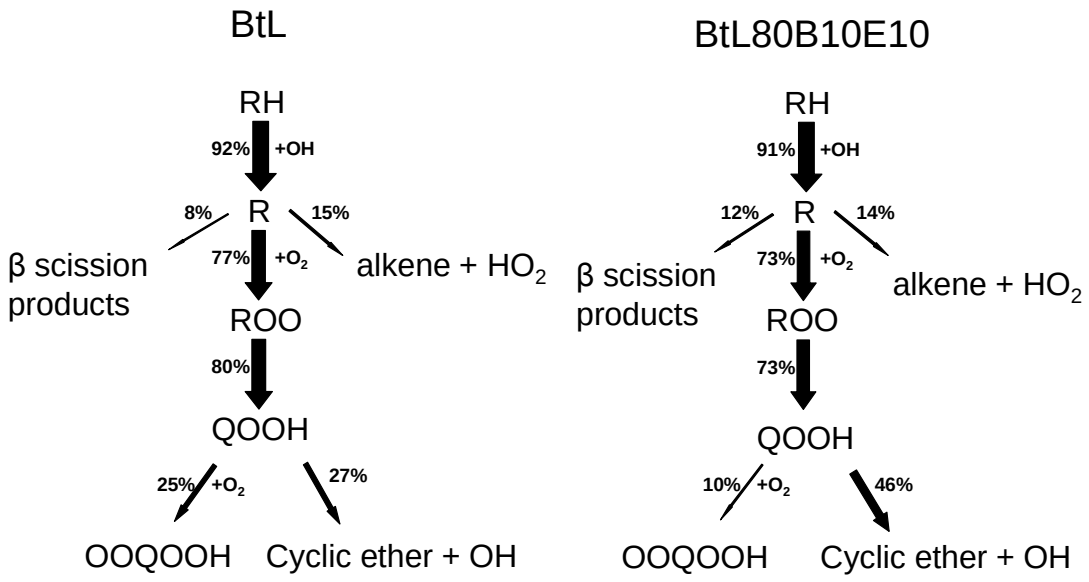



Figure IV-27 : Principales voies réactionnelles du n-décane pour les mélanges GtL et GtL80B10E0 : P=10 bar, φ=2 et T=740 K

La formation du radical alkyle (R), son oxydation en alcène et sa β-décomposition semblent peu affectés par la présence de l'éthanol. Les étapes d'addition d'oxygène pour

former des radicaux peroxyalkyles (ROO) et d'isomérisation pour produire les radicaux hydroperoxyalkyles (QOOH) sont légèrement inhibées dans le cas du mélange GtL80B10E10. Ces étapes sont nécessaires pour permettre la formation des radicaux hydroperoxyalkyles peroxy (OOQOOH) dont la décomposition est un branchement dégénéré menant à la formation de plusieurs radicaux hydroxyles. L'inhibition de ces deux étapes explique donc en partie la perte de réactivité du décane dans le mélange GtL80B10E10. De plus, on observe que la réaction de décomposition de QOOH en éther cyclique est favorisée dans le cas du mélange GtL80B10E10 par rapport à l'addition d'oxygène pour former les radicaux OOQOOH. Cette décomposition étant une étape de propagation, sa compétition avec la voie menant à la décomposition des radicaux OOQOOH entraine une diminution de la formation de petits radicaux et donc une diminution de la réactivité. Ces changements dans les voies réactionnelles peuvent être expliqués par un changement dans le pool radicalaire suite au captage d'une partie des radicaux hydroxyles par l'éthanol.

# 6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'oxydation en réacteur auto-agité de mélanges binaires, ternaires et quaternaires d'espèces modèles représentatives des carburants GtL, GtL/biodiesel et GtL/biodiesel/éthanol : n-décane, iso-octane, octanoate de méthyle, éthanol. Les expériences ont été réalisées à haute pression (10 atm) pour 3 richesses (0,5 ; 1 et 2) et dans un large domaine de température (550-1150 K).

Nos résultats expérimentaux ont été simulés à l'aide du mécanisme cinétique d'oxydation quaternaire mis au point dans le chapitre III. Les prévisions du modèle s'avèrent en bon accord avec l'expérience même si la cinétique de formation de certains produits (acétaldéhyde et méthane notamment) nécessite quelques améliorations.

Une partie de ce travail à fait l'objet d'une publication dans le journal « Combustion Science and Technology » en 2012 sous le titre : « Experimental and numerical study of F-T/biodiesel/bioethanol surrogate fuel oxidation in jet stirred reactor » [202].

Dans le chapitre suivant, la combustion de quatre mélanges issus de notre matrice carburant sera étudiée en moteur monocylindre Diesel.

# Chapitre V
# Étude expérimentale de la combustion de biocarburants en moteur monocylindre Diesel

# 1. Introduction

Dans ce chapitre, notre objectif est d'évaluer l'impact de l'utilisation de carburants alternatifs sur la combustion et les émissions de polluants en moteur Diesel. Pour cela une campagne d'essais a été menée sur banc équipé d'un moteur monocylindre Diesel. Ces essais ont été réalisés pour trois points de fonctionnement permettant une caractérisation rapide de la combustion à charge partielle. Des comparaisons entre les différents carburants ont été effectuées :

- A iso-réglage moteur de manière à apporter des éléments de compréhension notamment sur l'influence des propriétés du carburant.
- Après optimisation des réglages afin d'obtenir la consommation minimale associée à chaque carburant tout en respectant les objectifs fixés pour les émissions de polluants.

Les carburants utilisés ont été choisis parmi ceux dont l'oxydation a déjà été étudiée en réacteur auto-agité dans le chapitre précédent afin de mieux comprendre le rôle de la chimie du carburant sur la combustion en moteur Diesel. La matrice carburant étudiée comporte un carburant de référence (GtL), un mélange GtL/EMHC et deux mélanges GtL/EMHC/éthanol. Cette phase d'essais comporte une analyse approfondie des émissions non réglementés (hydrocarbures C1-C9, aldéhydes et cétones).

# 2. Présentation des moyens d'essais

## 2.1 Caractéristiques du moteur utilisé

Les essais sur banc moteur ont été réalisés sur un moteur monocylindre Diesel IFPEN dont les principales caractéristiques sont données dans le Tableau V-1. Le pilotage du moteur a été effectué à l'aide du logiciel Morphée 2 et l'acquisition des voies rapides a été réalisée à l'aide du logiciel Osiris.

Tableau V-1 : Caractéristiques du moteur utilisé

| | |
|---|---|
| Type de moteur | Injection directe Diesel |
| Nombre de cylindre | 1 |
| Nombre de soupapes | 2 admission + 2 échappement |
| Cycle | 4 temps |
| Alésage | 85 mm |
| Course | 88 mm |
| Longueur de bielle | 144 mm |
| Cylindrée | 500 $cm^3$ |
| Rapport volumétrique de compression | 16 : 1 |

Le système d'injection utilisé lors de ces essais est un système 'common rail' Bosch de 2$^{eme}$ génération qui comprend une pompe à carburant haute pression et un injecteur Bosch CRI2.2. Les essais ont été réalisés avec un bol de géométrie conventionnelle et l'injecteur était équipé d'une buse à 7 trous. Les principales caractéristiques du système d'injection sont données dans le Tableau V-2.

Tableau V-2 : Caractéristiques du système d'injection utilisé

| | |
|---|---|
| Système d'injection | Bosch CRI2.2 |
| Nombre de trous | 7 |
| Angle de nappe | 153° |
| Perméabilité de l'injecteur | 720 mL/min |

## 2.2 Configuration du circuit EGR

Le moteur est équipé d'un circuit de recirculation des gaz d'échappement avec deux échangeurs permettant de réguler la température des gaz brûlés avant leur réadmission. Le taux d'EGR est mesuré grâce à l'analyseur 5 gaz via la mesure précise de la teneur en CO2 à l'admission (cf. équation V-1).

$$Tx_{EGR} = 100 * \frac{[CO_2]_{adm} - [CO_2]_{air}}{[CO_2]_{EGR} - [CO_2]_{air}} \qquad \text{(E V-1)}$$

## 2.3 Méthodes de prélèvement et d'analyse

### 2.3.1 Prélèvement et analyse des polluants réglementés

Pour quantifier les émissions des polluants réglementés CO, NOx et HC totaux, une baie 5 gaz Pierburg AMA2000 a été utilisée. Les gaz ont été prélevés et analysés en temps réel. Les mesures de fumées ont été réalisées à l'aide d'un fumimètre AVL 415S tout au long de notre expérience.

### 2.3.2 Prélèvement et analyse des HC légers $C_1$-$C_9$

Afin de déterminer les teneurs individuelles en hydrocarbures $C_1$-$C_9$ dans les gaz d'échappement du moteur testé au banc, une méthode de prélèvement et d'analyse par chromatographie en phase gazeuse a été mise au point lors de cette étude. Le prélèvement se fait directement dans les gaz bruts en sortie d'échappement. Un système de pompage et de filtration chauffé, associé à des cannes de prélèvement assure le transfert des gaz vers une boucle d'injection placée sur un chromatographe en phase gazeuse.

Le chromatographe en phase gazeuse utilisé pour cette analyse est un Shimadzu GC 2010+. Les HC de type $C_1$-$C_9$ sont séparés à l'aide d'une colonne $Al_2O_3KCl$ et détectés individuellement au moyen d'un détecteur à ionisation de flamme (FID). L'hélium est utilisé comme gaz vecteur avec un débit de 10mL/min dans la colonne de séparation. Afin de quantifier précisément le débit de fuite et le débit circulant dans la colonne, deux mesures sur des étalons de propane sont réalisés chaque matin. Afin d'avoir une bonne séparation des hydrocarbures légers, une montée en température de la colonne a été programmée (2,5°C/min pendant 66 minutes) suivie d'un plateau à 200°C pendant 24 minutes. Cette méthode nous a permis de détecter 59 espèces différentes.

### 2.3.3 Prélèvement et analyse des aldéhydes et des cétones

Le prélèvement et l'analyse des aldéhydes et cétones s'effectue comme suit : les gaz sont prélevés à l'échappement grâce à une canne chauffée (dont la température est régulée à 180°C) reliée à un micro-tunnel de dilution. L'échantillon gazeux dilué passe alors au travers d'une cartouche en silice sur laquelle a été greffée de la 2,4 dinitrophénylhydrazine (DNPH). Les aldéhydes et cétones réagissent instantanément avec la DNPH pour former des dérivés hydrazones qui sont retenus sur ce support.

Une fois les gaz échantillonnés au sein de cartouches DNPH, les aldéhydes et les cétones dérivés sont ensuite élués avec un solvant constitué de 65% vol. d'acétonitrile et de 35% vol. d'eau pure avant d'être analysés par chromatographie en phase liquide. Le chromatographe liquide haute performance (HPLC) utilisé pour l'analyse des aldéhydes et des cétones lors de nos essais moteurs était un modèle Shimadzu LC-20 équipé d'une colonne

Agilent éclipse XDB-C18 et d'un détecteur UV. Le solvant vecteur est un mélange d'eau et d'acétonitrile dans des proportions 35/65 (% vol.).

Le calibrage de l'appareillage chromatographique est réalisé en utilisant une solution étalon certifiée. Cette méthode nous a permis de détecter 14 aldéhydes et 1 cétone à l'échappement.

## 2.4 Répétabilité des essais et incertitude de mesure

Comme précédemment montré par D. Alseda [203], les essais sur banc moteur subissent un écart de répétabilité dû à la variabilité des conditions expérimentales. Les écarts de température de l'air admission, l'usure ou l'encrassement du moteur sont autant de facteurs menant à une dispersion des résultats d'essais d'un jour sur l'autre, et parfois même d'un essai sur l'autre. De plus, les cycles moteurs varient les uns par rapport aux autres, même en condition stabilisée. Cependant, nous nous sommes efforcés de respecter une variation (exprimée en écart-type de PMI cycle à cycle) inférieure à 3% lors de nos essais. Les différentes valeurs acquises étant moyennés sur 100 cycles ou sur 30 s, on émettra l'hypothèse que cette légère variation peut être négligée.

Concernant l'incertitude associée aux mesures de polluants à l'échappement, il existe quatre sources principales d'erreur. Tout d'abord, comme nous venons de le voir, les cycles moteurs ne sont pas parfaitement répétables. De plus, il existe une incertitude sur le débit de prélèvement ainsi que sur le débit d'injection des gaz dans le chromatographe. Il faut également tenir compte de l'incertitude sur le taux de dilution de l'échantillon. En additionnant tous ces paramètres on peut estimer l'incertitude globale sur les résultats expérimentaux à environ 20%.

Afin de s'assurer de la répétabilité des mesures, des analyses de polluants ont été réalisées avec le carburant de référence sur les trois points moteurs testés au début et à la fin des essais.

# 3. Méthodologie

## 3.1 Matrice carburant

La matrice testée comporte 4 carburants dont les principales propriétés sont regroupées dans le Tableau V-3. Ces formulations ont été obtenues suite au mélange de trois carburants initiaux.

- GtL : Gas to Liquid produit à l'IFPEN par un procédé propre développé au sein de l'entreprise. Il contient 30% vol. de n-paraffine et 70% vol. d'iso-paraffine.

- EMHC : ester méthylique d'huile de colza fournit par Oléon. Carburant majoritairement constitué d'esters méthyliques à 18 atomes de carbone contenant 1000 ppm d'additif antioxydant (BHT).
- Ethanol : Ethanol anhydre fournit par IFPEN.

Tableau V-3 : Matrice carburant testée sur moteur monocylindre Diesel

| Nom | Densité (à 15°C) | PCI* ($kJ.kg^{-1}$) | Teneur en C (% mass.) | Teneur en H (% mass.) | Teneur en O (% mass.) | Indice de cétane (mesuré) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| GtL | 0,778 | 43903 | 84,76 | 15,24 | / | 85 |
| GtL40B60 | 0,838 | 39554 | 82,39 | 13,14 | 4,47 | 59,5 |
| GtL80B10E10 | 0,784 | 41520 | 81,09 | 14,64 | 4,27 | 59 |
| GtL40B30E30 | 0,799 | 36956 | 74,05 | 13,51 | 12,44 | 42,6 |

*Pouvoir Calorifique Inférieur

Le GtL a servi de carburant de référence à cette étude. Comme on peut le voir dans le Tableau V-3, c'est un carburant de synthèse ayant un indice de cétane très élevé et un PCI massique important ce qui en fait un carburant particulièrement adapté pour une application en moteur à allumage par compression. Le mélange GtL40B60 a été obtenu en mélangeant 40% vol. de GtL avec 60% vol. d'EMHC. Le mélange GtL80B10E10 est un mélange ternaire contenant 10% vol. d'EMHC et 10% vol. d'éthanol. Les carburants GtL40B60 et GtL80B10E10 possèdent un indice de cétane et un rapport O/C massique très proches. La comparaison des résultats obtenus avec ces deux mélanges permet donc d'étudier l'impact spécifique de l'éthanol sur la combustion Diesel. Le dernier carburant étudié au cours de cette étude est un mélange contenant 40% vol. de GtL, 30% vol. d'EMHC et 30% vol. d'éthanol. La forte teneur en éthanol de ce mélange entraine une baisse importante de l'indice de cétane et du PCI. Il est important de préciser que le mélange GtL40B30E30 ne respecte pas les spécifications fixées par la commission européenne pour le gazole (notamment du fait de son indice de cétane très faible). Son étude nous a néanmoins permis de comprendre l'impact d'un carburant fortement enrichi en éthanol sur la combustion Diesel.

## 3.2 Conditions expérimentales

Afin de pouvoir étudier l'impact de la formulation sur l'initiation et le déroulement de la combustion, les points de fonctionnement suivants ont été étudiés :

- Régime moteur de 1500 tr/min – PMI de 3 bar
- Régime moteur de 2500 tr/min – PMI de 6 bar
- Régime moteur de 2000 tr/min – PMI de 11 bar

Afin de faciliter la compréhension et la simulation de nos cas moteur, tous les essais ont été réalisés en mono-injection. Ce fonctionnement n'est pas représentatif des stratégies

actuelles d'injection sur moteur Diesel, où l'on arrive fréquemment à 4 injections par cycle. La portée des résultats que nous allons détailler dans ce qui suit est donc restreinte à un cadre académique, où la volonté de compréhension des phénomènes prime sur le reste. L'auteur ne peut en aucun cas garantir que les tendances observées seraient extrapolables à une stratégie de combustion en multi-injection.

Les quatre carburants étudiés ayant des densités énergétiques très différentes, nous avons décidé d'étudier leur combustion à iso-quantité d'énergie injectée. Pour cela, la durée d'injection a été adaptée à chacun des carburants étudiés en fonction de son PCI et de sa densité de manière à conserver un débit d'énergie introduite constant (Qcarb en kJ/h).

Pour chaque point de fonctionnement, la combustion du GtL a été étudiée puis optimisée afin de trouver la meilleure consommation spécifique indiquée possible. Les autres carburants ont ensuite été testés en conservant le maximum de réglages du moteur constants par rapport aux réglages optimisés du GtL: avance à l'injection (AVI), quantité d'énergie injectée, pression rail (Prail), température à l'admission (T2), pression à l'admission (P2), pression à l'échappement (P3). Cela nous a permis d'étudier l'influence de la formulation du carburant sur le fonctionnement du moteur à iso-réglage.

Ensuite, nous avons étudié l'effet du phasage de l'injection et du taux de dilution sur la combustion des quatre carburants en faisant varier l'avance à l'injection (±2 et ±4°V par rapport au point de réglage optimal du GtL) ainsi que le taux d'EGR (0 à 30 % par pas de 10 %). Les paramètres fixés pour chaque point de fonctionnement étudié sont recensés dans le Tableau V-4.

Tableau V-4 : Points de fonctionnements

| **Régime moteur (tr/min)** | **PMI (bar)** | **AVI (°V)** | **EGR (% vol.)** | **Prail (bar)** | **P2 (bar)** | **P3 (bar)** | **T2 (°C)** | **Qcarb ($kJ.h^{-1}$)** |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1500 | 3 | 6 ±2, ±4 | 0-30 | 600 | 1,05 | 1,15 | 50 | 16640 |
| 2500 | 6 | 18 ±2, ±4 | 0-30 | 700 | 1,4 | 1,5 | 50 | 50970 |
| 2000 | 11 | 14 ±2, ±4 | 0-30 | 1000 | 1,6 | 1,7 | 50 | 77490 |

Enfin, pour les quatre carburants testés, des optimisations ont été réalisées afin de trouver le meilleur compromis NOx/fumées sur chaque point de fonctionnement. La démarche d'optimisation utilisée tout au long de cette étude consiste à obtenir la valeur minimale de consommation spécifique indiquée (CSI) tout en respectant les objectifs cibles pour les émissions de fumées et de NOx. Pour cela, la CSI a été minimisé pour chacun des carburants par recalage de l'avance injection. Puis le meilleurs compromis NOx/fumées a été trouvé par variation du taux de recirculation des gaz brûlés. Le Tableau V-5 recense les

valeurs seuils fixées concernant les émissions de NOx et de fumées pour chacun des points de fonctionnement étudiés.

Tableau V-5: Valeurs cibles NOx/fumées pour chaque point de fonctionnement

| Régime (tr/min) | Charge (bar) | Cible NOx (g/kWh) | Cible fumées (FSN)* |
|---|---|---|---|
| 1500 | 3 | < 0,5 | < 0,5 |
| 2500 | 6 | < 0,75 | < 2 |
| 2000 | 11 | < 1,5 | < 3 |

*Filter Smoke Number

Le bruit de combustion n'a quant à lui pas été limité de façon contraignante dans notre méthodologie d'essais. Or, le bruit est un critère à respecter de façon non négociable lors de la mise au point d'un moteur pour des raisons évidentes d'image de marque et de respect de la législation. Ce choix est donc critiquable, d'autant plus que les critères de bruit sont parmis les plus difficiles à atteindre lors du processus de calibration des moteurs. Cependant, comme nous nous situons ici dans une étape très en amont de la mise au point d'un moteur, nous avons choisi de nous laisser ce degré de liberté supplémentaire afin de pouvoir réaliser nos investigations sur l'influence des propriétés des carburants.

## 3.3 Présentation des résultats

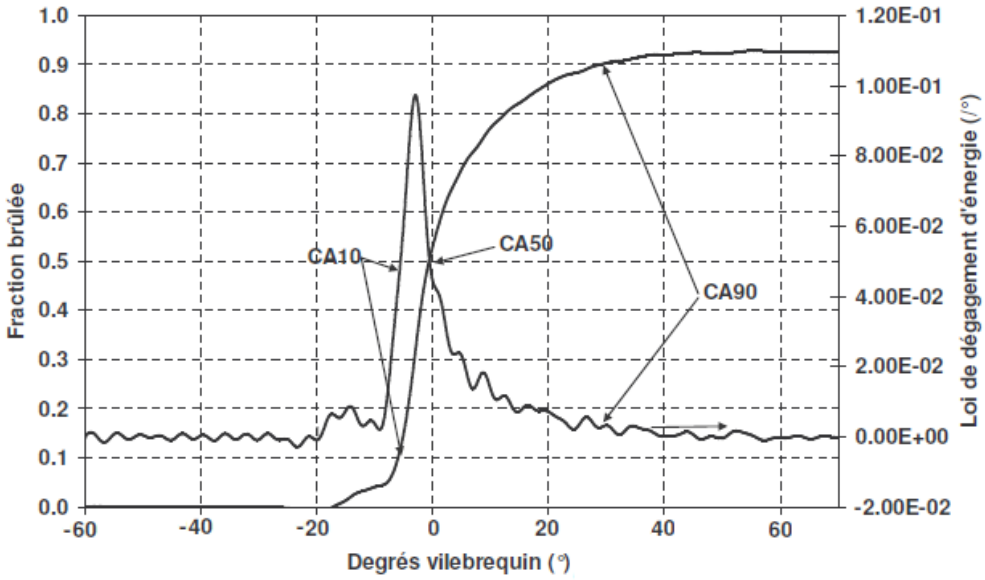



Figure V-1 : Représentation du dégagement d'énergie et de la fraction brûlée

Pour chaque carburant, les degrés vilebrequin correspondant au CA10 (degré vilebrequin pour lequel 10 % du carburant a été brûlé) au CA50 (degré vilebrequin pour lequel la moitié du carburant a été brûlé) et au CA90 (degré vilebrequin pour lequel 90 % du

carburant a été brûlé) ont été relevés (cf. Figure V-1). En effet, ces valeurs donnent de bonnes indications de l'avancement de la combustion :

- CA10-AVI : le temps écoulé entre le phasage de l'injection et l'instant où 10% du carburant est brûlé donne une bonne représentation du délai d'auto-inflammation du carburant.
- CA90-CA10 : le temps écoulé entre le CA10 et le CA90 représente la durée de combustion.

Pour l'ensemble des Figures à venir, l'angle 0°V correspondra au point mort haut de fin de compression.

# 4. Point de fonctionnement 1500 tr/min - 3 bar

## 4.1 Iso-réglages

Afin de rester à iso-quantité d'énergie injectée, nous avons adapté la durée d'injection en fonction du PCI de chaque carburant afin de conserver le même débit de carburant recalculé en kJ/h. Pour ce point de fonctionnement, le Ti a été fixé à 475 µs pour le GtL, 491 µs pour le GtL40B60, 483 µs pour le Gtl80B10E10 et 506 µs pour le GtL40B30E30 afin de conserver un débit carburant recalculé proche de 16600 kJ/h pour chaque carburant.

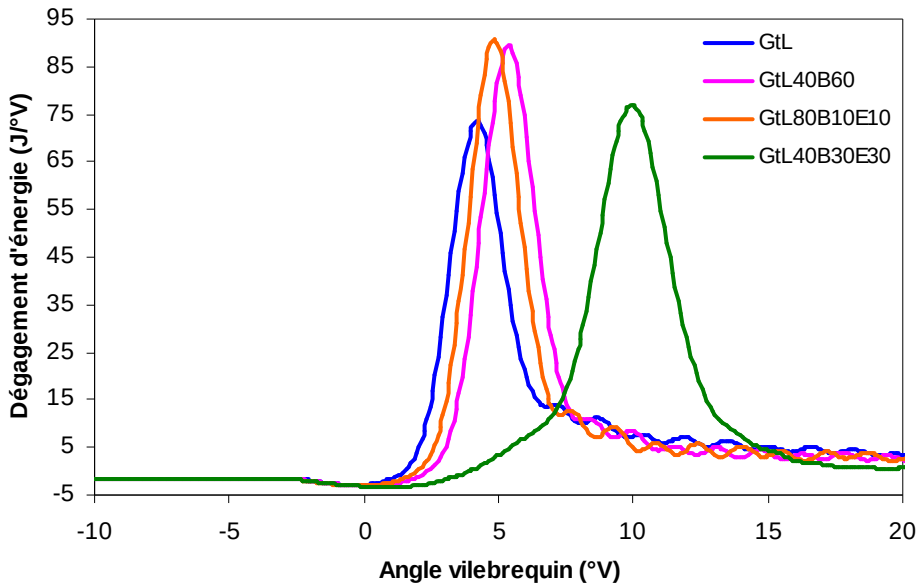



Figure V-2: Analyse de combustion des carburants à iso-réglages (1500 tr/min, PMI=3 bar)

Avec l'iso-réglage choisi, le délai d'auto-inflammation des mélanges GtL40B60 et GtL80B10E10, défini par le temps écoulé entre le phasage d'injection et le CA10, est légèrement plus long (1 et 0,5°V respectivement) que celui du GtL. Quant au mélange contenant 30 % vol. d'éthanol, son auto-inflammation est retardée de 4,6°V. Cet effet est

facilement explicable au vue de l'indice de cétane respectif de chacun des mélanges (cf. Tableau V-3). En effet, l'ajout d'une quantité importante d'éthanol rend l'auto-inflammation du mélange beaucoup plus lente et décale d'autant le dégagement d'énergie. Le faible écart entre les délais d'auto-inflammation du GtL (IC=85) et des mélanges GtL80B10E10 et GtL40B60 (IC=60) malgré leurs indices de cétane différents s'explique quant à lui par le fait que les conditions thermodynamiques sont suffisantes pour permettre une auto-inflammation rapide de tous les carburants ayant un indice de cétane corrects. La différence entre le GtL et les deux autres mélanges serait plus visible dans des conditions thermodynamiques plus critiques.

## 4.1.1 Variation AVI

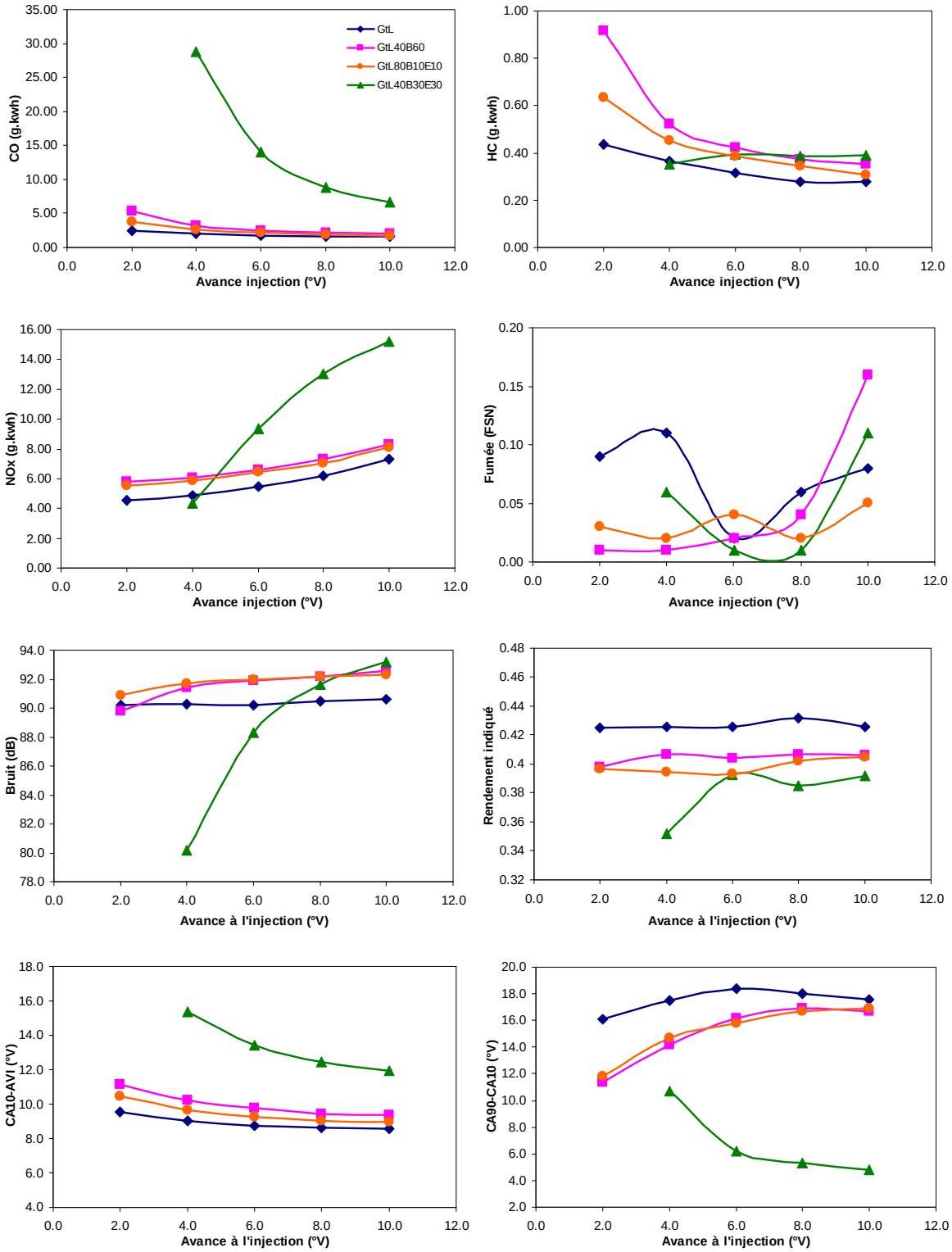



Figure V-3 : Essais banc moteur monocylindre (1500 tr/min, PMI=3 bar) – variation AVI

La Figure V-3 présente les résultats expérimentaux obtenus lors d'une variation d'avance pour les quatre carburants testés à 1500 tr/min et pour une PMI de 3 bar. Les mélanges GtL40B60 et GtL80B10E10 suivent une même tendance tout le long de la plage de

variation du phasage de l'injection. La présence de composés oxygénés dans le mélange entraine une auto-inflammation plus longue que pour le GtL (cf. CA10-AVI) et une combustion plus rapide (cf. CA90-CA10) et plus bruyante. Ceci est dû à la réduction de l'indice de cétane qui augmente le délai d'auto-inflammation, et ce faisant, augmente la proportion de la combustion qui se déroule en pré-mélange au lieu d'être en diffusion. La combustion en pré-mélange a pour caractéristique principale d'être plus rapide que la combustion diffusive, et donc plus génératrice de NOx et de bruit : c'est bien cela qui explique les différences observées entre le comportement du GtL d'une part et celui des mélanges GtL40B60 et GtL80B10E10 d'autre part. Par ailleurs, une injection plus précoce rapproche les performances de ces mélanges de celles obtenues avec le GtL tandis qu'une injection plus tardive dégrade la combustion de ces carburants, ce qui se traduit par une diminution du bruit et des émissions de HC et CO plus importantes.

En revanche, le mélange GtL40B30E30 présente un comportement atypique par rapport aux autres carburants. Son indice de cétane très faible entraine une combustion fortement pré-mélangée, ayant lieu dans la détente. Cette combustion génère donc beaucoup de NOx et est très bruyante dès que l'on cherche à la recaler. Lors d'une injection plus tardive, sa combustion déjà instable se dégrade fortement, entrainant une baisse importante du bruit et du rendement de combustion ainsi qu'une augmentation drastique des émissions de CO.

On notera que ce point de fonctionnement n'est pas adapté pour étudier l'impact des composés oxygénés sur les émissions de suie. En effet, dans ces conditions, le niveau de fumée reste toujours très bas quel que soit le carburant testé, et les variations observées sont de l'ordre de grandeur de la précision de l'appareil de mesure.

## 4.1.2 Variation EGR

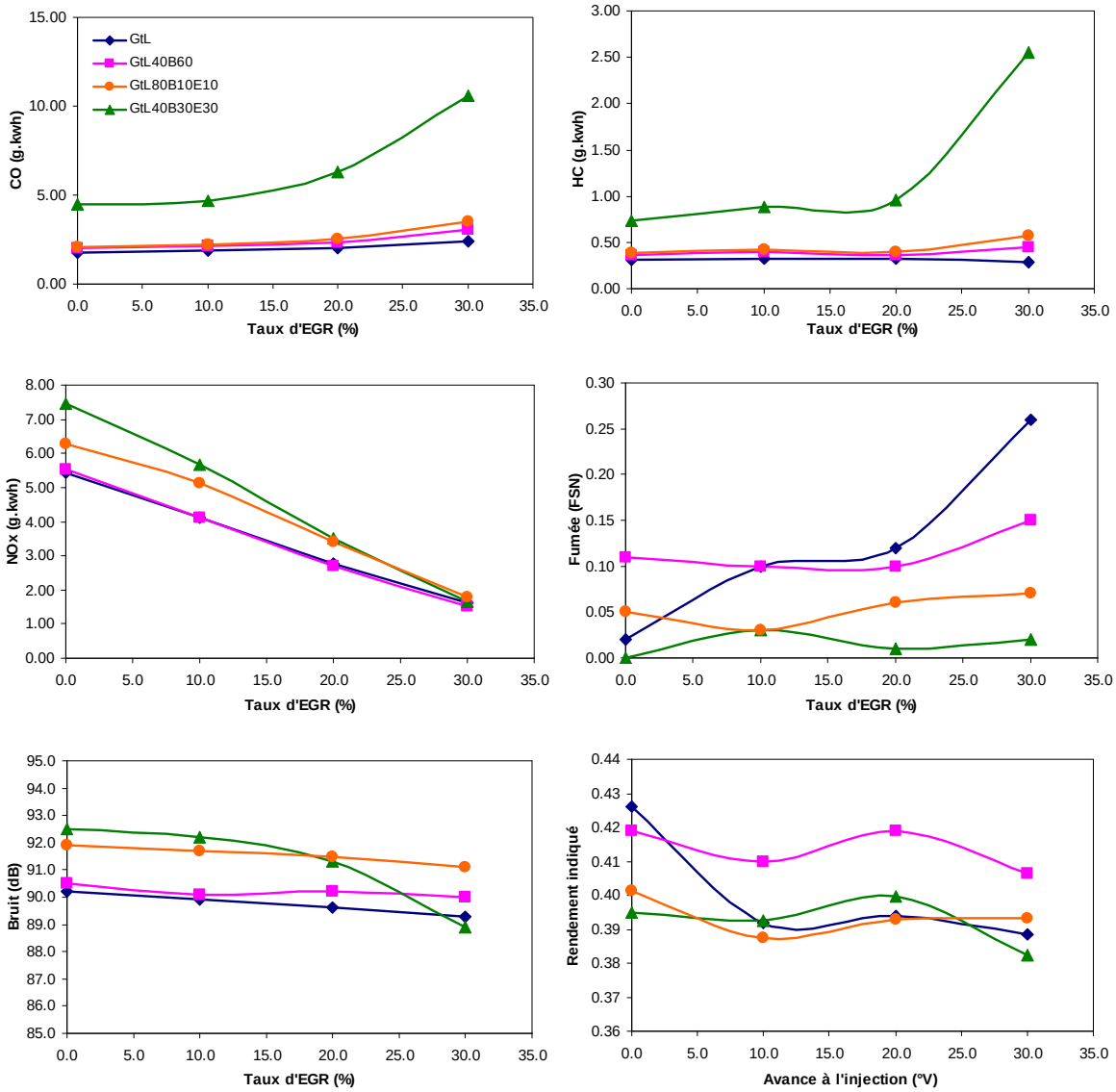



Figure V-4 : Essais banc moteur monocylindre (1500 tr/min, PMI=3 bar) – variation EGR

La Figure V-4 présente les résultats expérimentaux obtenus lors de la variation d'EGR par pas de 10% pour une avance à l'injection de 6°V avant le PMH. Les 4 carburants suivent les tendances habituelles le long de la plage de variation d'EGR : une diminution des NOx et une augmentation des fumées. On peut remarquer que l'effet inhibiteur de l'éthanol sur la formation des suies est de plus en plus visible à mesure que le taux d'EGR augmente. En effet, les émissions de fumées des carburants GtL et GtL40B60 augmentent avec le taux d'EGR tandis que celles des mélanges contenant de l'éthanol restent relativement stables sur toute la gamme d'EGR testée. Concernant les trois premiers carburants, l'augmentation d'EGR n'entraine qu'une très légère variation des émissions de CO et d'HC. Pour le mélange GtL40B30E30 en revanche, les émissions de HC et CO augmentent très fortement à mesure que le taux d'EGR augmente. Ceci peut être expliqué par la combustion tardive de ce

carburant. La présence d'une importante quantité de gaz brulés dans la chambre de combustion dégrade encore plus les conditions de températures et entraine donc une oxydation incomplète du carburant et une formation importante de CO et d'hydrocarbures imbrûlés.

## 4.2 Optimisation

La phase de comparaison à iso-réglage nous a permis de mettre en évidence certaines différences de comportement dues aux propriétés physico-chimiques des mélanges testés. Dans un deuxième temps, les réglages moteurs ont été optimisés par minimisation de CSI sous contrainte NOx/fumées pour chacun des mélanges de biocarburants. Pour ce point de fonctionnement, les cibles définis étaient 0,5 g/kW.h de NOx et 0,5 FSN maximum. Les résultats sont présentés à iso-NOx (recalage à l'objectif via le taux d'EGR) afin de clarifier la comparaison.

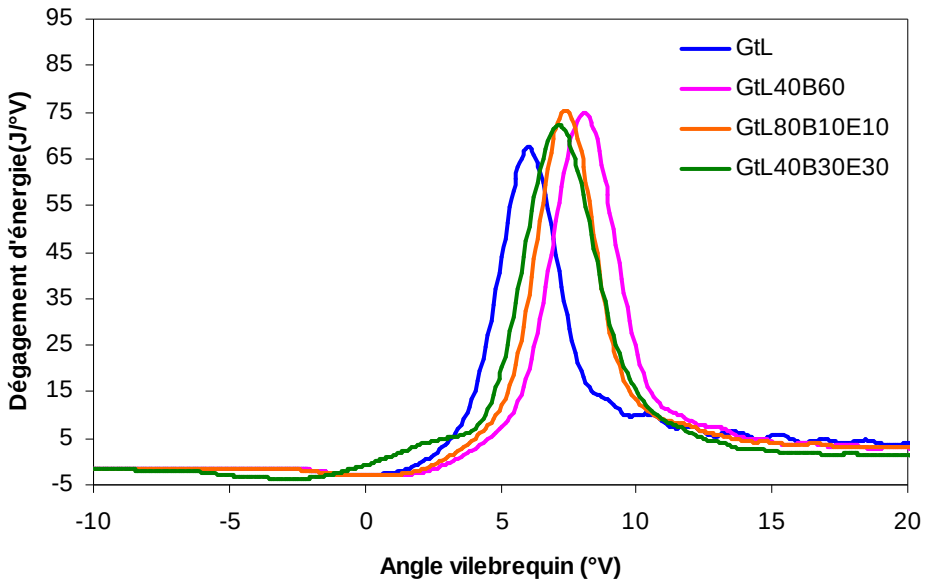



Figure V-5 : Analyse de combustion des carburants après optimisation
(1500 tr/min, PMI = 3 bar)

L'analyse de combustion des quatre carburants étudiés après optimisation est présentée sur la figure V-5. Un recalage de l'avance à l'injection a permis de réduire les écarts de dégagement d'énergie et de mieux contrôler la combustion des mélanges contenant des composés oxygénés. En particulier, une injection plus précoce et un taux de dilution important permet de recaler la combustion du mélange GtL40B30E30 dont le dégagement d'énergie était beaucoup plus tardif à iso-réglage.

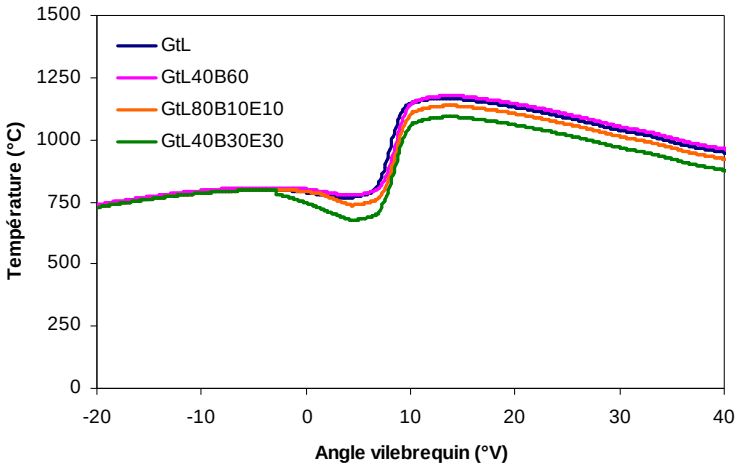



Figure V-6 : Influence de la composition du carburant sur la température moyenne des gaz (1500 tr/min, PMI = 3 bar)

La Figure V-6 représente la température moyenne des gaz lors de la combustion optimisée des 4 carburants pour le point de fonctionnement 1500 tr/min 3 bar de PMI. La présence d'éthanol dans le mélange entraine une diminution de la température de combustion. Cette diminution peut s'expliquer par la forte chaleur latente de vaporisation de l'éthanol qui fait chuter la température de flamme.

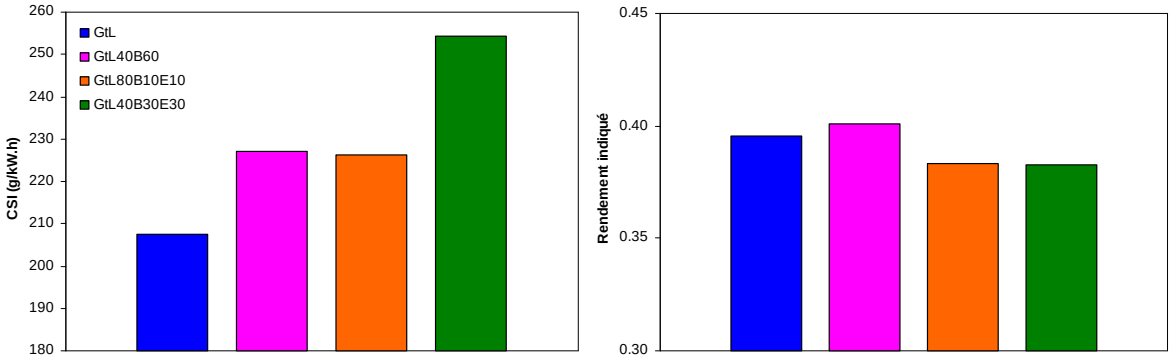



Figure V-7 : Influence de la composition du carburant sur la CSI et le rendement indiqué (1500 tr/min, PMI=3 bar)

La Figure V-7 présente les CSI optimisées obtenues lors de la combustion des 4 mélanges étudiés. On remarque que l'ajout de composés oxygénés dans le mélange entraine une augmentation de la CSI par rapport au GtL. Cette augmentation est de l'ordre de 9% pour les mélanges GtL40B60 et GtL80B10E10 et atteint 23% pour le mélange GtL40B30E30.

Afin de comprendre les écarts observés sur la CSI et de mettre en évidence la part de cette augmentation due à la diminution du PCI du carburant, les résultats ont été présentés sous forme de rendement indiqué qui s'exprime comme suit :

$$\eta_i = \frac{3{,}6.10^6}{(CSI * PCI)} \qquad \text{(E V-2)}$$

Cette représentation permet de mettre en évidence que le rendement indiqué après optimisation du carburant fortement enrichi en éthanol n'est pas fortement impacté par rapport aux autres carburants. La forte augmentation de la CSI de ce mélange est donc principalement due à la diminution du PCI du carburant lorsqu'une quantité importante d'éthanol est ajoutée au mélange (cf. Tableau V-3). On observe néanmoins une légère baisse de rendement lors de l'utilisation des 2 mélanges contenant de l'éthanol dans ces conditions.

### 4.2.1 Polluants réglementés

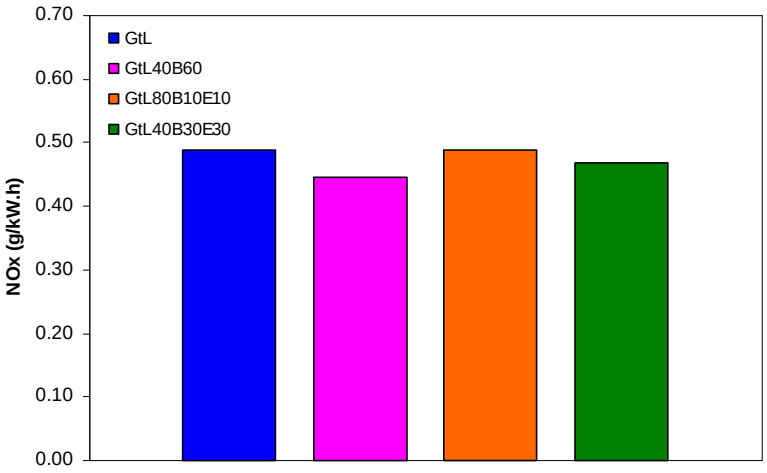



Figure V-8 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en NOx à l'échappement (1500 tr/min, PMI=3 bar)

Comme le montre la Figure V-8, l'optimisation des paramètres moteurs nous a permis d'atteindre les objectifs fixés en terme d'émission de NOx pour tous les carburants testés sur ce point de fonctionnement (< 0,5 g/kW.h).

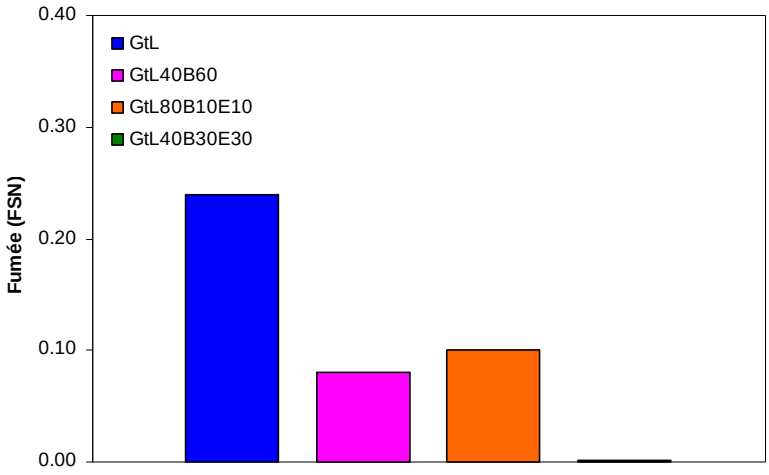



Figure V-9 : Influence de la composition du carburant sur les fumées à l'échappement (1500 tr/min, PMI=3 bar)

Concernant les fumées, on voit que la présence de composés oxygénés dans le mélange entraine une légère baisse du niveau de fumée (cf. Figure V-9). Les mélanges GtL40B60 et GtL80B10E10 génèrent un niveau de fumée de l'ordre de 0,1. Ce résultat va à l'encontre des résultats expérimentaux démontrant une efficacité accrue de l'éthanol pour réduire les fumées par rapport aux esters méthyliques [204]. Quant au mélange contenant 30 % d'éthanol en volume, aucune fumée n'a été détectée à l'échappement pour ce point de fonctionnement. Néanmoins, il existe un degré d'incertitude non négligeable sur ces observations puisque, dans tous les cas, le niveau de fumée est très bas.

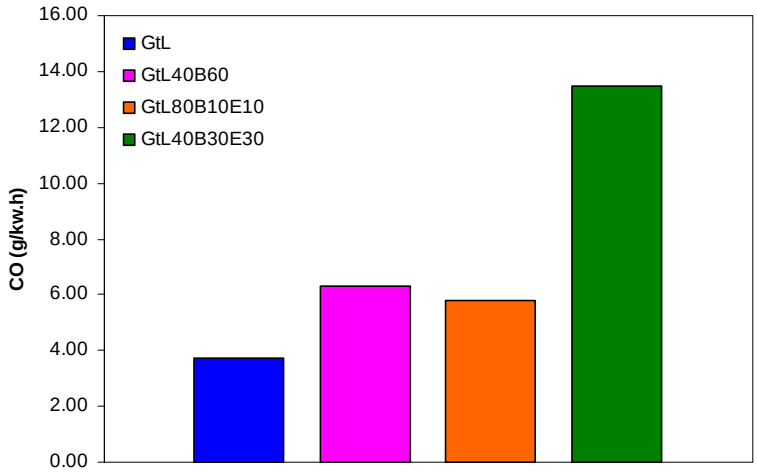



Figure V-10 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en CO à l'échappement (1500 tr/min, PMI=3 bar)

Pour ce point de fonctionnement, la présence de composés oxygénés entraine une augmentation des émissions de CO en fin de combustion (cf. Figure V-10). Cette

augmentation est de l'ordre de 60 % pour les mélanges GtL40B60 et GtL80B10E10. Pour le mélange GtL40B30E30, cette augmentation est bien plus importante (de l'ordre de 260 %). Ceci est dû à la grande chaleur latente de vaporisation de l'éthanol qui entraine une baisse de la température dans la chambre de combustion. Pour ce point de fonctionnement faiblement chargé, la température dans le cylindre est trop faible pour permettre une oxydation efficace du monoxyde de carbone.

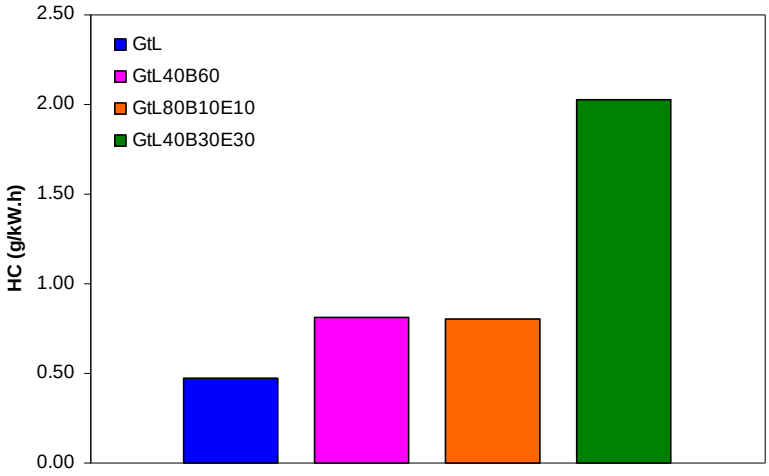



Figure V-11 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en HC imbrûlés à l'échappement (1500 tr/min, PMI=3 bar)

La Figure V-11 présente les émissions en hydrocarbures imbrulés pour les quatre carburants testés à 1500 tr/min et une PMI de 3 bar. On retrouve la même tendance que celle observée pour les émissions de CO : une augmentation des hydrocarbures imbrûlés à l'échappement lorsque la teneur en composés oxygénés augmente. Les quantités de HC formés lors de la combustion du mélange GtL40B30E30 sont de loin supérieures à celles des trois autres carburants. Ceci peut à nouveau s'expliquer du fait de la haute chaleur latente de vaporisation de l'éthanol qui fait chuter la température de flamme et favorise la formation d'hydrocarbures imbrûlés. Ces résultats sont en accord avec d'autres résultats expérimentaux disponibles dans la littérature [26,45,66,69,83].

## 4.2.2 Polluants non-réglementés

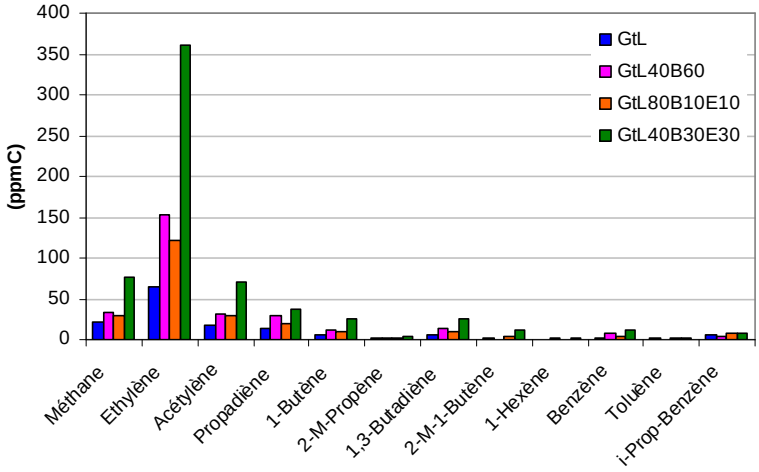



Figure V-12 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en HC $C_1$-$C_9$ à l'échappement (1500 tr/min, PMI=3 bar)

La chromatographie en phase gazeuse nous a permis d'analyser la répartition des HC de petite taille en fonction du carburant étudié. On retrouve bien sur la figure V-12 l'augmentation importante des émissions d'hydrocarbures imbrûlés lors de la combustion du mélange GtL40B30E30 que nous avions observé pour les HC totaux avec la baie 5 gaz (cf. Figure V-11). On remarque également que cette augmentation se traduit en particulier par des émissions très importantes en $C_2H_4$. Ce résultat semble logique puisque l'éthylène est l'un des produits de dégradation principaux de l'éthanol selon la réaction :

$$C_2H_5OH\,(+M) = C_2H_4 + H_2O\,(+M) \qquad \text{(R V-1)}$$

Cette concentration importante en éthylène à l'échappement peut être mise en parallèle avec le fait que nous n'avons pas identifié de quantité importante d'éthanol dans les gaz brûlés, y compris pour les mélanges enrichis en éthanol. Ces résultats semblent montrer qu'une grande partie de l'éthanol se décompose en éthylène selon la réaction V-1 dans ces conditions.

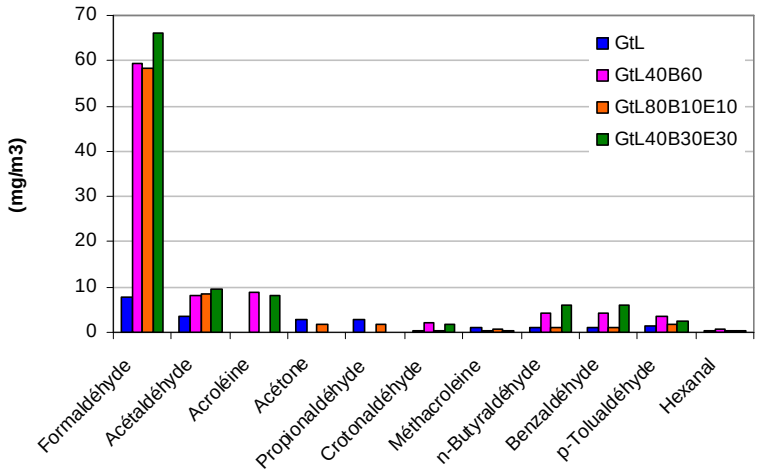



Figure V-13 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en aldéhydes et cétones à l'échappement (1500 tr/min, PMI=3 bar)

Nous avons également étudié l'influence du carburant sur les émissions en produits oxygénés. Les principaux aldéhydes et cétones identifiés lors de la combustion des quatre carburants étudiés sont présentés sur la Figure V-13. On observe une augmentation nette des émissions d'aldéhydes pour les 3 carburants oxygénés par rapport au GtL. Le principal composé oxygéné identifié est le formaldéhyde. Contrairement à ce que nous avions observé en réacteur auto-agité, l'augmentation du volume d'éthanol dans le mélange ne semble pas entrainer une augmentation importante des émissions d'acétaldéhyde à l'échappement puisque les concentrations en $CH_3HCO$ sont du même ordre de grandeur pour les mélanges GtL40B60, GtL80B10E10 et GtL40B30E30 contenant respectivement 0, 10 et 30 % vol. d'éthanol. On remarque des émissions non négligeables en acroléine pour les deux mélanges contenant de grandes quantités d'ester méthylique. Ce résultat est en accord avec les observations obtenues en réacteur auto-agité ou l'acroléine avait été identifiée comme un des produits de dégradation de l'octanoate de méthyle.

# 5. Point de fonctionnement 2500 tr/min - 6 bar

## 5.1 Iso-réglages

Afin de rester à iso-quantité d'énergie injectée, nous avons adapté la durée d'injection en fonction du PCI de chaque carburant afin de conserver le même débit de carburant recalculé (en kJ/h). Pour ce point de fonctionnement, le Ti a été fixé à 560 µs pour le GtL, 605 µs pour le GtL40B60, 600 µs pour le Gtl80B10E10 et 625 µs pour le GtL40B30E30 afin de conserver un débit carburant recalculé proche de 51000 kJ/h pour chaque carburant.

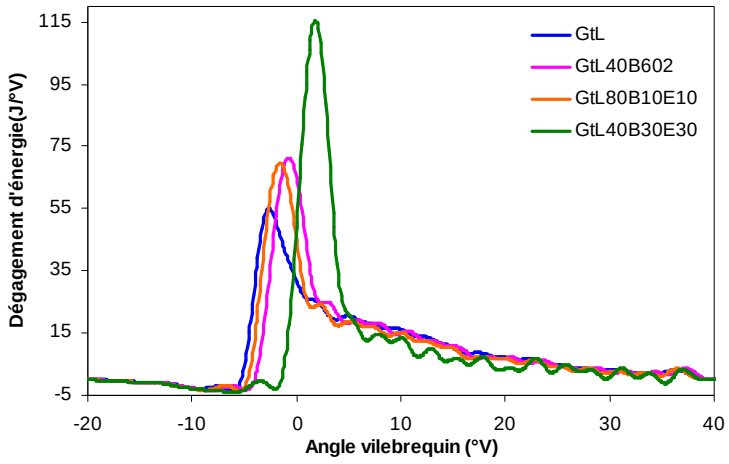



Figure V-14 : Analyse de combustion des carburants à iso-réglages (2500 tr/min, PMI=6 bar)

La Figure V-14 représente l'analyse de combustion des quatre carburants testés sur le point de fonctionnement 2500 tr/min et 6 bar de PMI en iso-réglages. Le faible indice de cétane du mélange GtL40B30E30 entraine la mise en place d'une flamme de pré-mélange très tardive et donc très intense (puisqu'une plus grande quantité de carburant est injectée avant que l'auto-inflammation ait lieu). Cela se traduit également par un niveau de bruit beaucoup plus important que pour les 3 autres carburants.

### 5.1.1 Variation AVI

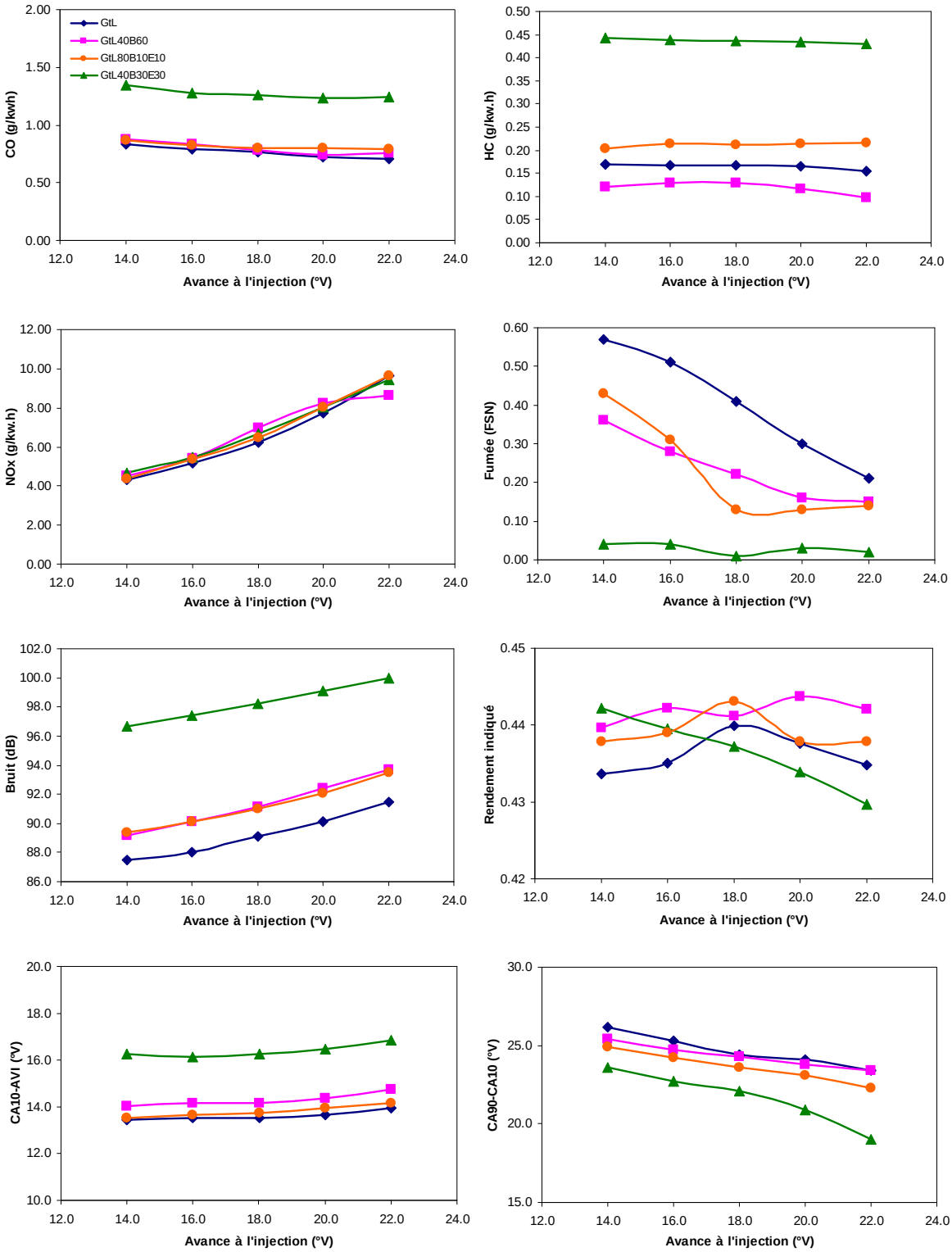



Figure V-15 : Essais banc moteur monocylindre (2500 tr/min, PMI=6 bar) – variation AVI

Les résultats expérimentaux obtenus lors d'une variation d'AVI pour le point de fonctionnement à 2500 tr/min et 6 bar de PMI en absence d'EGR sont présentés sur la Figure V-15. Les trois premiers carburants suivent une tendance à peu près similaire : émissions de

HC et CO peu impactées par l'avance à l'injection, diminution des NOx et augmentation des fumées pour des injections plus tardives. La présence de composés oxygénés dans les carburants GtL40B60 et GtL80B10E10 se traduit néanmoins par un délai d'auto-inflammation plus long, allant de pair avec une combustion de pré-mélange plus intense (donc plus bruyante). On remarque également que ces deux carburants entrainent une diminution à peu près équivalente du niveau de fumée. En ce qui concerne le mélange GtL40B30E30, son indice de cétane très faible entraine une auto-inflammation tardive et une combustion rapide. Ceci se traduit par un bruit beaucoup plus élevé. Le mauvais calage de la combustion entraine une formation plus importante de CO et HC tandis que la forte teneur en éthanol associée au caractère fortement pré-mélangé de la combustion permet une réduction drastique des émissions de suie.

## 5.1.2 Variation EGR

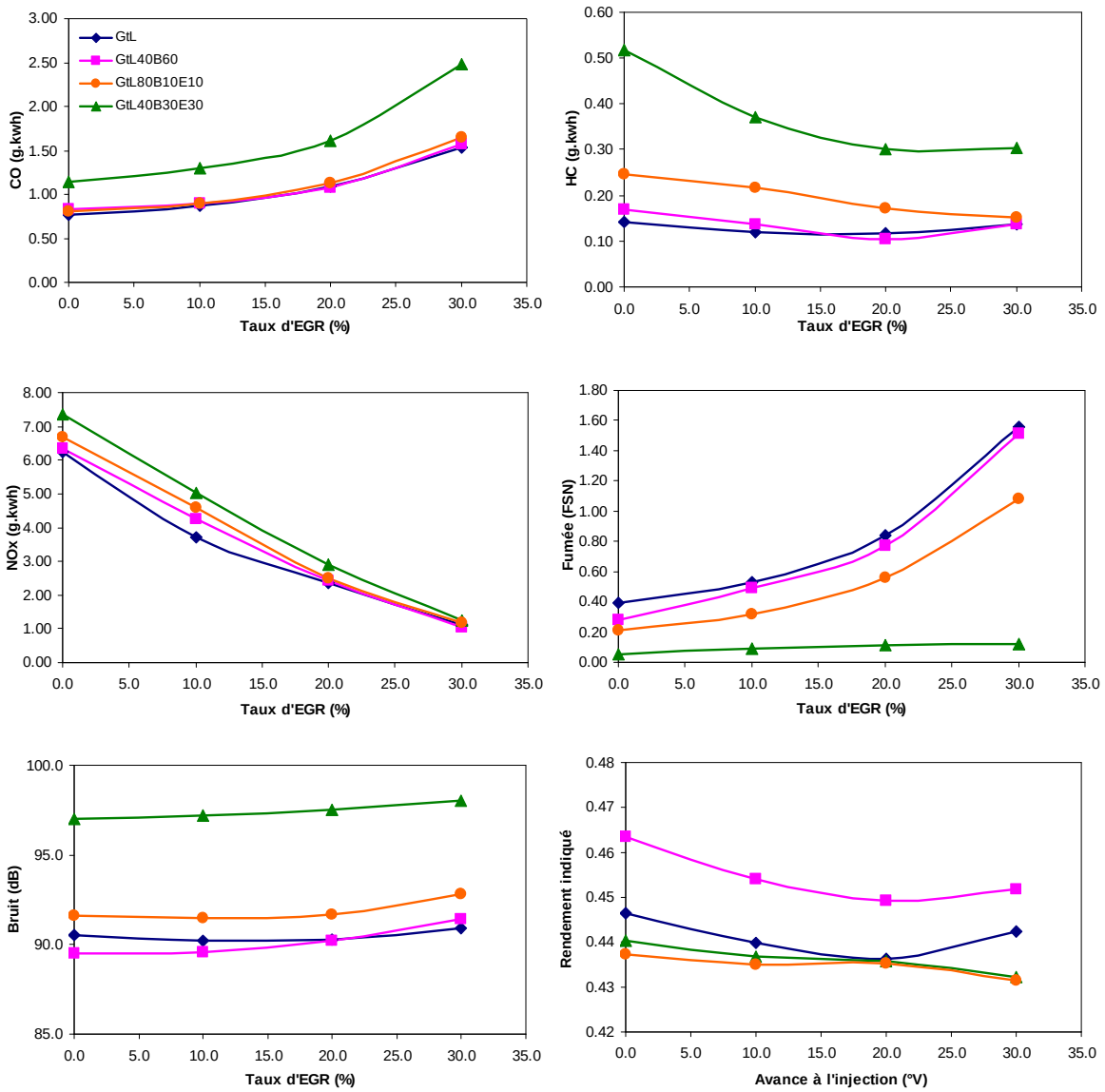



Figure V-16 : Essais banc moteur monocylindre (2500 tr/min, PMI=6 bar) – variation EGR

La Figure V-16 représente les résultats expérimentaux obtenus lors d'une variation d'EGR à 2500 tr/min - 6 bar pour une avance 18°V avant le PMH. Sur cette figure, l'intérêt de l'éthanol pour réduire les émissions de suie apparait clairement. En effet, si le mélange GtL80B10E10 donne des résultats similaires au mélange GtL40B60 en termes de niveau de fumée en l'absence d'EGR ; il se démarque clairement de celui-ci lorsque le niveau d'EGR augmente en permettant une réduction substantielle des émissions de particules. Quant au mélange contenant 30 % vol. d'éthanol, son niveau de fumée reste proche de zéro sur toute la gamme de variation d'EGR testée.

## 5.2 Optimisation

La combustion de chacun des carburants étudiés a été optimisée par recalage de l'AVI et variation du taux d'EGR de façon à minimiser la consommation spécifique indiquée tout en respectant les allocations sur les émissions de NOx et de fumées. Pour ce point de fonctionnement, les valeurs seuils d'émissions de NOx et de fumées étaient fixées à 0,75 g/kW.h et 2 FSN respectivement (cf. Tableau V-5). Les résultats sont présentés à iso-NOx (recalage à l'objectif via le taux d'EGR) afin de clarifier la comparaison.

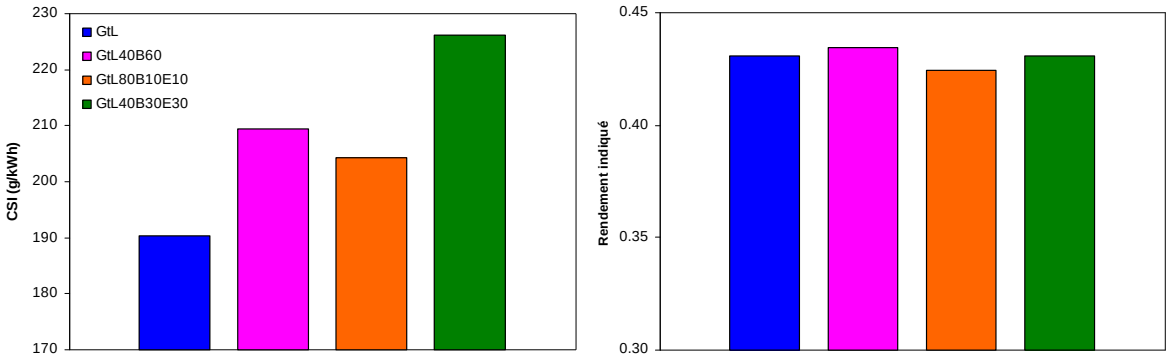



Figure V-17 : Influence de la composition du carburant sur la CSI et le rendement indiqué (2500 tr/min, PMI=6 bar)

La présence de composés oxygénés dans le mélange se traduit à nouveau par une augmentation de la CSI (cf. Figure V-17). Néanmoins, l'étude du rendement indiqué de chacun des mélanges montre que cette augmentation est en grande partie due à la diminution de PCI des carburants puisque dans tous les cas de figures, le rendement est proche de 0,43. L'utilisation de mélanges oxygénés en moteur Diesel n'entraine donc pas de perte significative de rendement sur ce point de fonctionnement.

## 5.2.1 Polluants réglementés

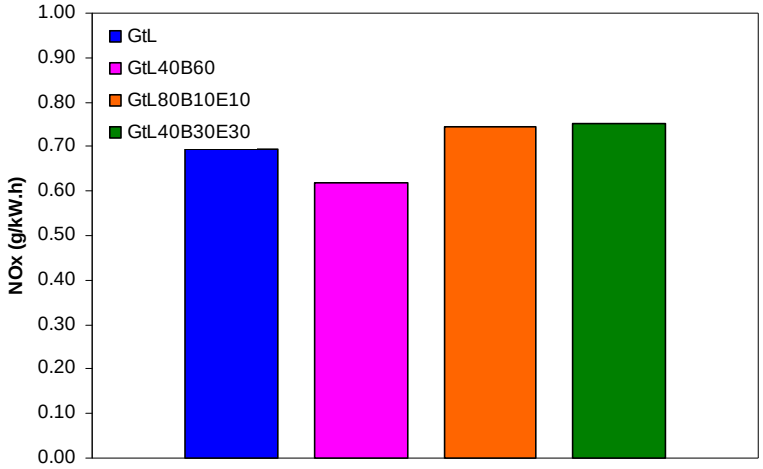



Figure V-18: Influence de la composition du carburant sur les émissions de NOx (2500 tr/min, PMI=6 bar)

Comme nous avons pu le voir sur les figures précédentes, les émissions de NOx sont à peu près équivalentes pour les quatre carburants testés sur ce point de fonctionnement (cf. Figure V-18). La valeur seuil en émission de NOx a donc pu être atteinte pour les quatre carburants pour ce point de fonctionnement (< 0,75 g/kW.h).

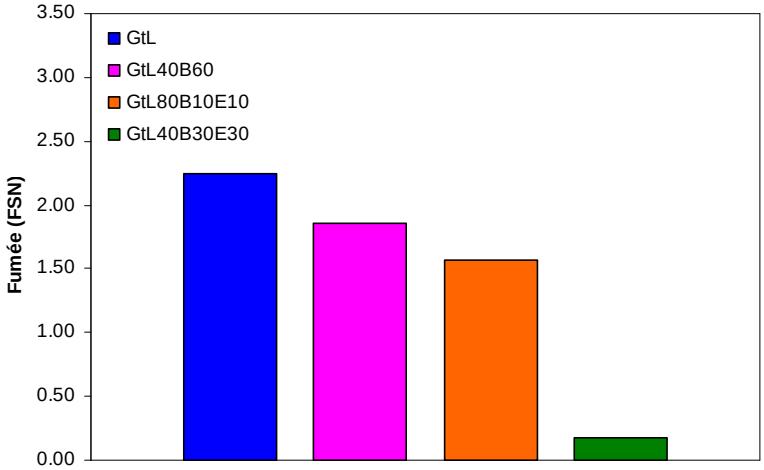



Figure V-19: Influence de la composition du carburant sur les fumées (2500 tr/min, PMI=6 bar)

La Figure V-19 permet de voir clairement l'impact des composés oxygénés sur la réduction des émissions de suie. Il est intéressant de comparer les résultats obtenus pour les mélanges GtL40B60 et GtL80B10E10 puisque ces deux carburants ont un indice de cétane et un rapport C/O massique très proche. Les résultats expérimentaux obtenus pour ces deux mélanges semblent corroborer les observations d'autres études ayant démontrées une efficacité accrue de l'oxygène de la molécule d'éthanol pour oxyder les suies par rapport à

l'oxygène contenu dans les esters méthyliques [88,89]. Le mélange GtL40B30E30 permet quant à lui une réduction drastique des émissions de suies, grâce à l'augmentation de la phase de pré-mélange et à la présence d'oxygène dans le carburant au cœur de la combustion.

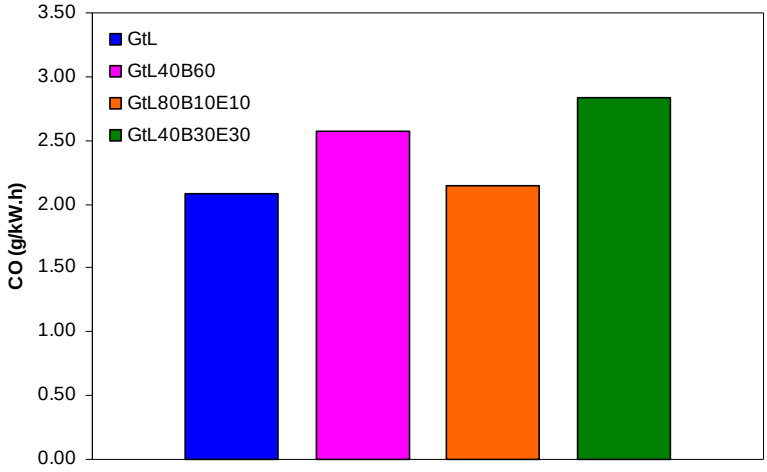



Figure V-20 : Influence de la composition du carburant sur les émissions de CO (2500 tr/min, PMI=6 bar)

Une fois optimisées, les émissions de CO des quatre carburants sont du même ordre de grandeur pour ce point de fonctionnement (cf. Figure V-20). Néanmoins, la forte chaleur latente de vaporisation de l'éthanol entraine une diminution de la température de combustion, ce qui peut expliquer la formation un peu plus importante de CO dans le cas du mélange contenant 30% volumique d'éthanol.

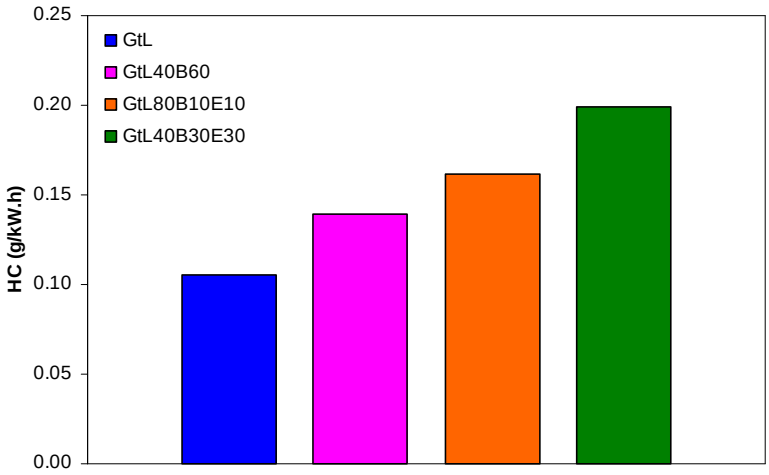



Figure V-21 : Influence de la composition du carburant sur les émissions de HC (2500 tr/min, PMI=6 bar)

Les émissions de HC mesurées sur ce point de fonctionnement sont très faibles quel que soit le carburant (cf. Figure V-21). On note néanmoins une augmentation des émissions

d'hydrocarbures imbrûlés à mesure que la quantité de composés oxygénés augmente dans le mélange.

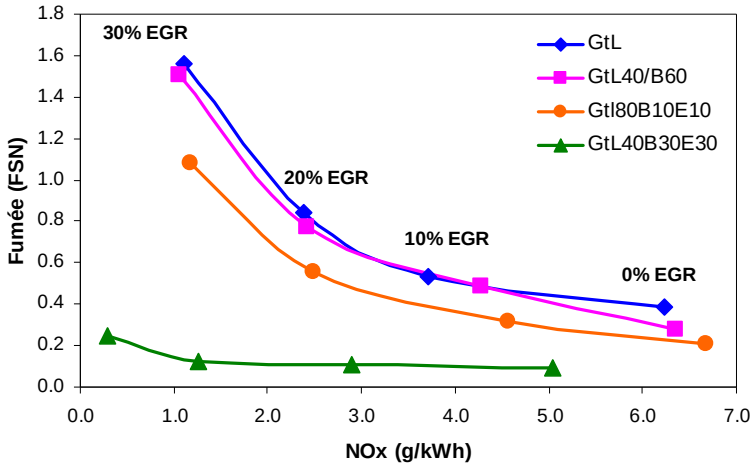



Figure V-22 : Effet de l'EGR sur le compromis NOx/fumées pour les quatre carburants testés (2500 tr/min, PMI=6 bar)

La Figure V-21 présente les compromis NOx/fumées obtenus pour les quatre carburants avec différents niveaux d'EGR pour un régime de 2500 tr/min et une PMI de 6 bar. L'un des principaux avantages de l'utilisation de mélanges contenant de l'éthanol en moteur Diesel est la réduction drastique des émissions de suie qui permet de faire recirculer un grand volume de gaz brulé, et donc de diminuer les émissions de NOx, sans pour autant atteindre des niveaux de fumée élevés. Ce phénomène a déjà été observé dans des études antérieures [33,205]. Dans le cas du GtL, une augmentation du taux d'EGR au delà de 20% entraine une augmentation rapide du niveau de fumée. Le mélange GtL40B60 suit une tendance identique. Le mélange GtL80B10E10 permet l'obtention d'un compromis NOx/particule plus intéressant que pour les deux premiers carburants. Enfin, le mélange GtL40B30E30 génère si peu de fumées qu'il permet une diminution très importante des émissions de NOx par recirculation des gaz brûlés sans jamais dépasser un niveau de fumée de 0,3.

### 5.2.2 Polluants non réglementés

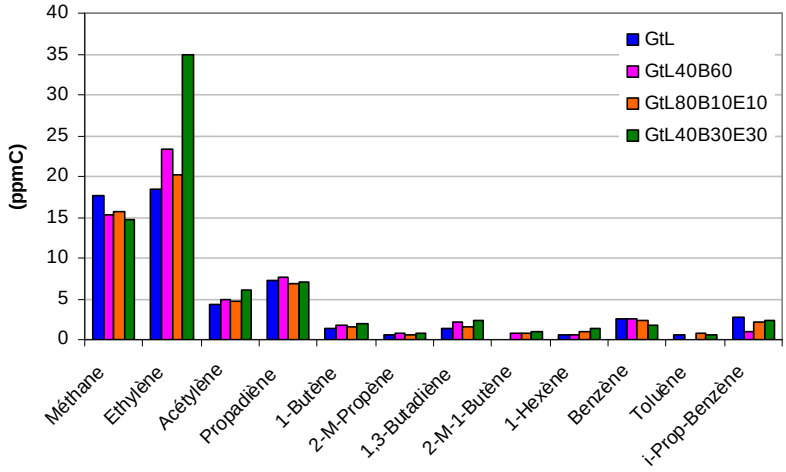



Figure V-23 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en HC $C_1$-$C_9$ à l'échappement (2500 tr/min, PMI=6 bar)

La Figure V-23 représente les principaux hydrocarbures imbrûlés identifiés par chromatographie en phase gazeuse sur les points moteurs optimisés de chacun des quatre carburants testés. Globalement, les émissions sont à peu près équivalentes pour les quatre mélanges excepté l'éthylène, dont la formation semble favorisée lors de l'oxydation du mélange GtL40B30E30. Comme pour le point de fonctionnement précédent, cette augmentation peut être expliquée par la quantité importante d'éthanol dans ce mélange qui peut se décomposer en éthylène selon la réaction R V-1.

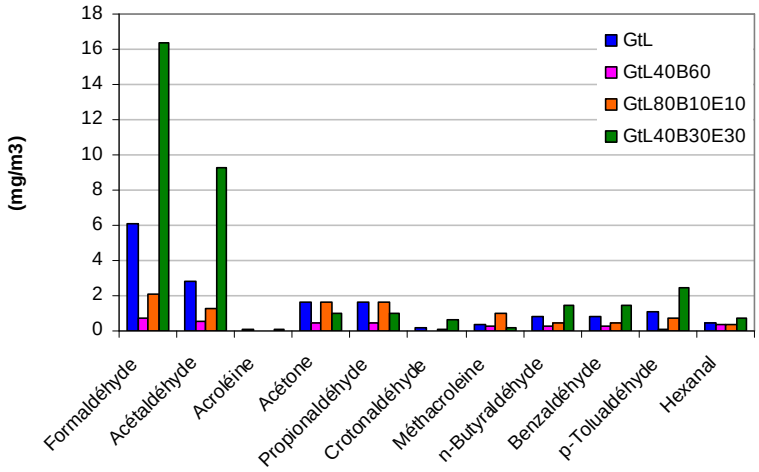



Figure V-24 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en aldéhydes et cétones à l'échappement (2500 tr/min, PMI=6 bar)

Les principaux aldéhydes et cétones identifiés lors de la combustion des quatre carburants testés sont présentés sur la Figure V-24. La principale indication de cette figure est l'augmentation importante des émissions de formaldéhyde et d'acétaldéhyde lors de la

combustion du mélange GtL40B30E30. Cette augmentation des émissions d'acétaldéhyde lors de la combustion du mélange fortement enrichi en éthanol s'explique facilement puisque le $CH_3HCO$ est l'un des principaux intermédiaires d'oxydation de l'éthanol formé selon les réactions R V-2 à R V-4:

$$CH_3CH_2O + M = CH_3HCO + H + M \quad \text{(R V-2)}$$

$$CH_3CH_2O + O_2 = CH_3HCO + HO_2 \quad \text{(R V-3)}$$

$$CH_3CH_2O + HO_2 = CH_3HCO + OH + OH \quad \text{(R V-4)}$$

# 6. Point de fonctionnement 2000 tr/min - 11 bar

## 6.1 Iso-réglages

Afin de rester à iso-quantité d'énergie injectée, nous avons adapté la durée d'injection en fonction du PCI de chaque carburant afin de conserver le même débit de carburant recalculé (en kJ/h). Pour ce point de fonctionnement, le Ti a été fixé à 750 µs pour le GtL, 820 µs pour le GtL40B60, 730 µs pour le Gtl80B10E10 et 840 µs pour le GtL40B30E30 afin de conserver un débit carburant recalculé proche de 77500 kJ/h pour chaque carburant.

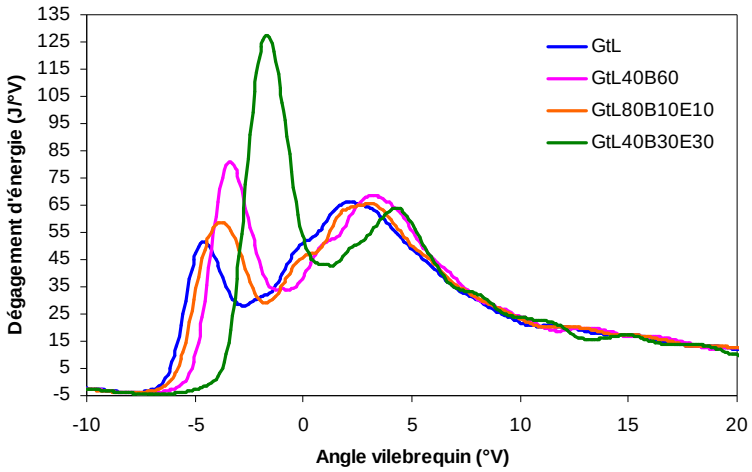



Figure V-25 : Analyse de combustion des carburants à iso-réglages (2000 tr/min, PMI=11bar)

Pour ce point de fonctionnement, on observe une flamme de pré-mélange suivie d'une flamme de diffusion pour les quatre carburants testés (cf. Figure V-25). L'intensité de la flamme de pré-mélange augmente à mesure que l'indice de cétane du carburant diminue (puisque plus de carburant est injecté avant l'inflammation). Dans le cas du mélange GtL40B30E30, cela se traduit par une flamme de pré-mélange très intense suivie d'une flamme de diffusion amoindrie.

## 6.1.1 Variation AVI

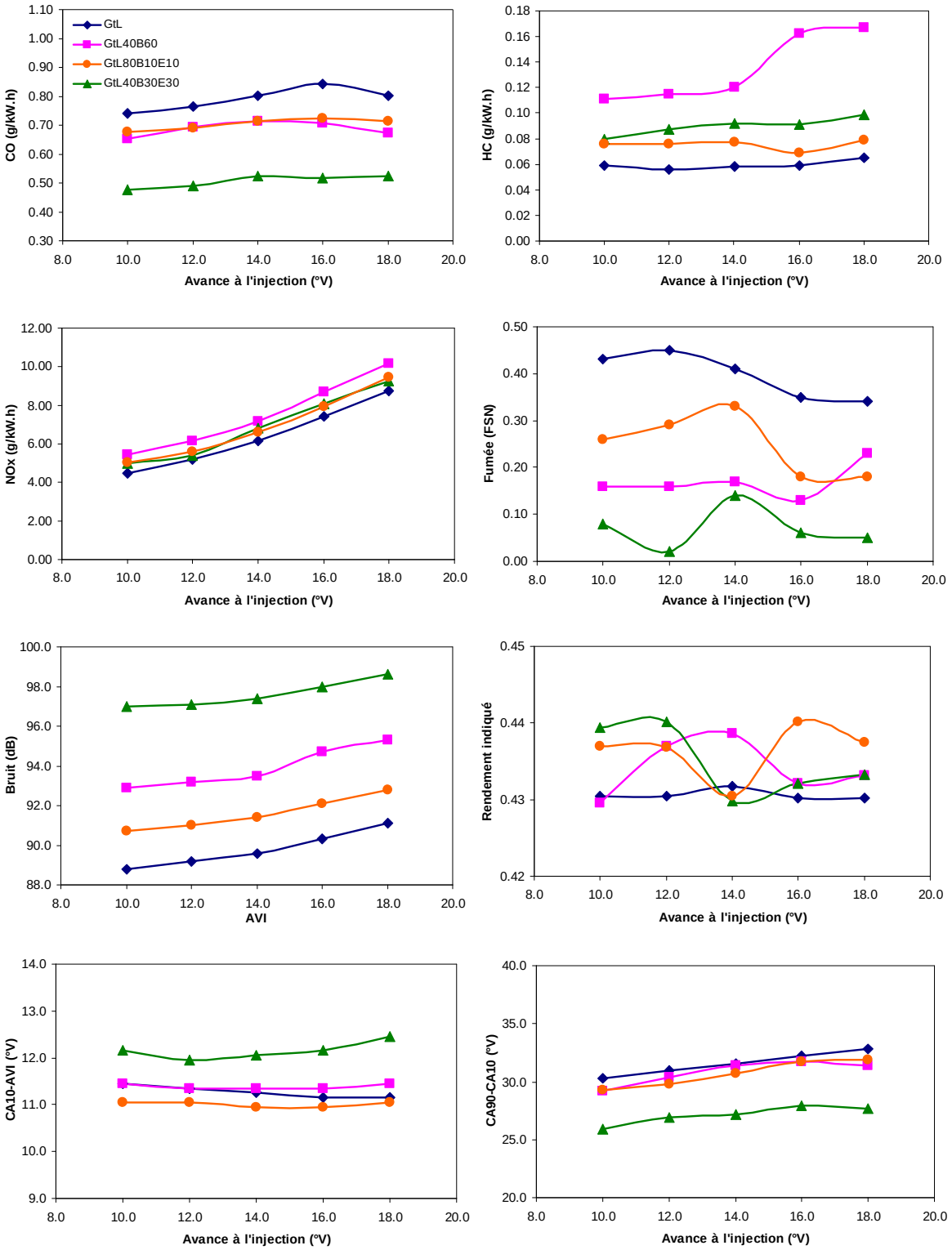



Figure V-26 : Essais banc moteur monocylindre (2000 tr/min, PMI=11 bar) – variation AVI

La Figure V-26 représente les résultats expérimentaux obtenus lors d'une variation d'AVI en absence d'EGR à 2000 tr/min et pour une PMI de 11 bar. Dans ces conditions, la température importante de la chambre de combustion minimise l'importance de l'indice de

cétane sur la combustion, ce qui se traduit par des délais d'auto-inflammation moins retardés pour les mélanges oxygénés en comparaison avec les résultats obtenus sur des points moins chargés. Les émissions de HC, de CO et de fumées sont faibles sur toute la gamme d'avances testées. La flamme de pré-mélange intense observée pour le carburant GtL40B30E30 sur la Figure V-25 se traduit ici par un bruit important et une durée de combustion plus courte.

## 6.1.2 Variation EGR

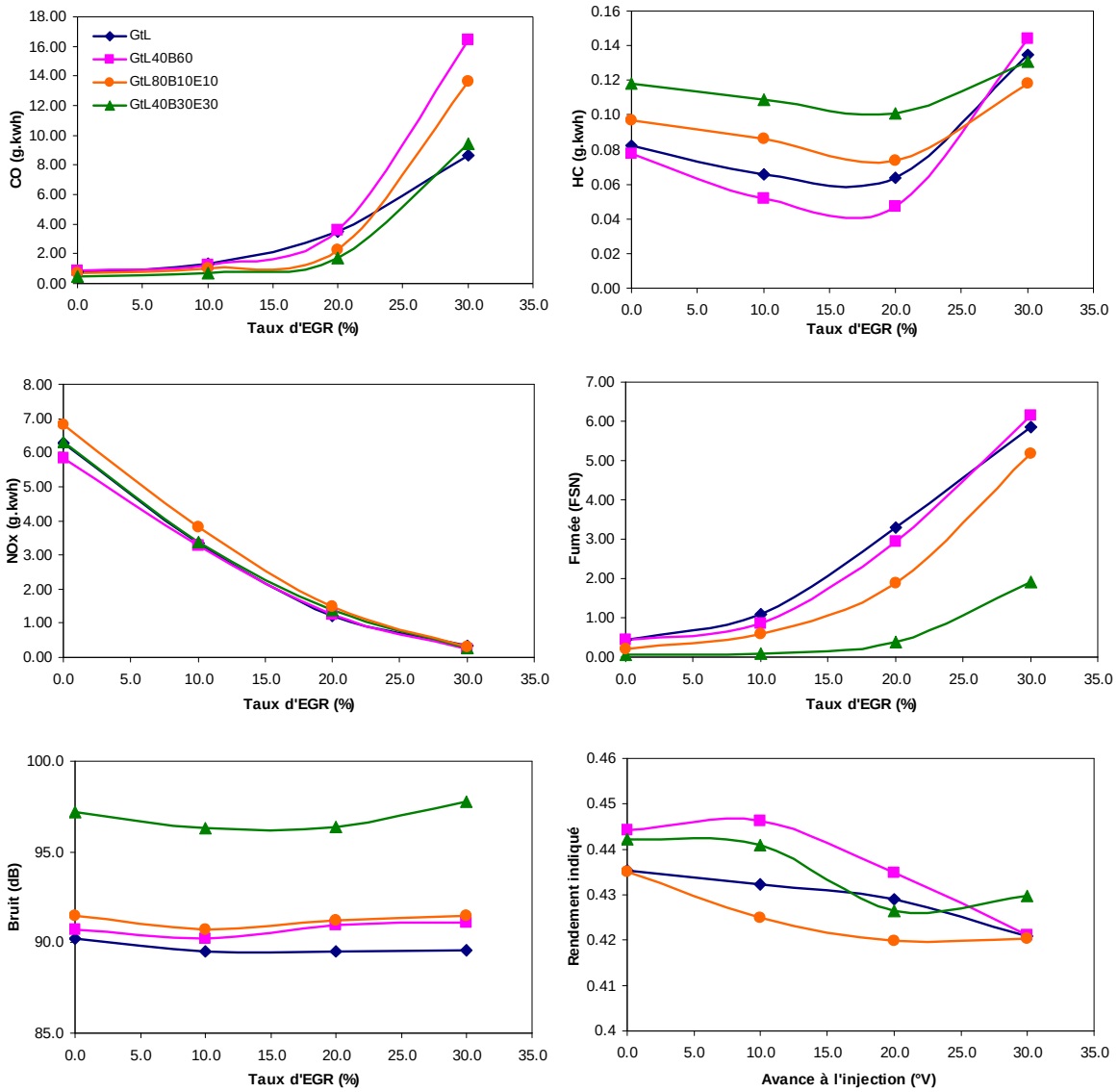



Figure V-27 : Essais banc moteur monocylindre (2000 tr/min, PMI=11 bar) – variation EGR

La Figure V-27 montre les résultats expérimentaux obtenus lors d'une variation d'EGR à 2000 tr/min et 11 bar de PMI pour une avance à l'injection de 14°V avant le PMH. Les quatre mélanges partagent des comportements communs : l'augmentation du taux d'EGR entraine une diminution des émissions de NOx conjuguée à une augmentation du niveau de fumée. De plus, on remarque que les émissions de CO et d'HC augmentent fortement pour des niveaux d'EGR supérieurs à 20%. Néanmoins, la quantité très élevée d'oxygène du

mélange GtL40B30E30 entraine quelques spécificités : le niveau de fumée reste assez faible même pour un taux d'EGR de 30% et sa combustion est beaucoup plus bruyante en raison de l'intensité de la flamme de pré-mélange.

## 6.2 Optimisation

Les paramètres moteurs ont été optimisés pour chacun des carburants étudiés afin de minimiser la consommation spécifique indiquée et de maitriser les émissions en NOx et en fumées. Pour ce point de fonctionnement les valeurs seuils ont été fixées à 1,5 g/kW.h pour les NOx et à 3 FSN pour le niveau de fumée.

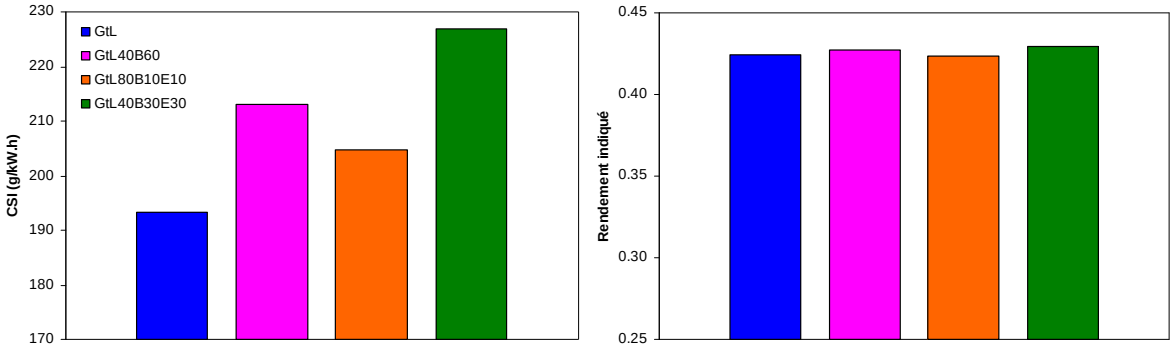



Figure V-28 : Influence de la composition du carburant sur la CSI et le rendement indiqué (2000 tr/min, PMI=11 bar)

La Figure V-28 présente les CSI et rendements indiqués optimisés obtenus pour chacun des carburants testés à 2000 tr/min et 11 bar de PMI. On observe une grande diversité au niveau des consommations indiquées qui s'explique principalement par la différence de PCI des mélanges. En effet, les rendements indiqués sont quasiment équivalents pour tous les carburants dans ces conditions.

## 6.2.1 Polluants réglementés

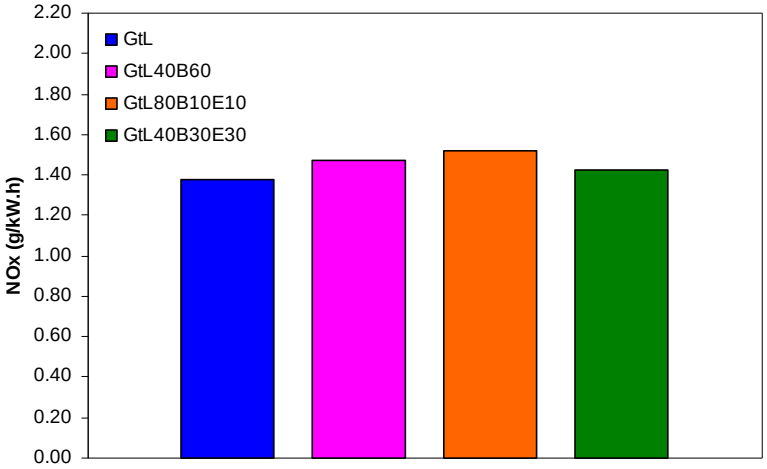



Figure V-29 : Influence de la composition du carburant sur les émissions de NOx (2000 tr/min, PMI=11 bar)

Comme le montre la Figure V-29, l'optimisation des paramètres moteurs pour chaque carburant permet d'atteindre la cible fixée pour les émissions de NOx pour les quatre carburants (< 1,5 g/kW.h).

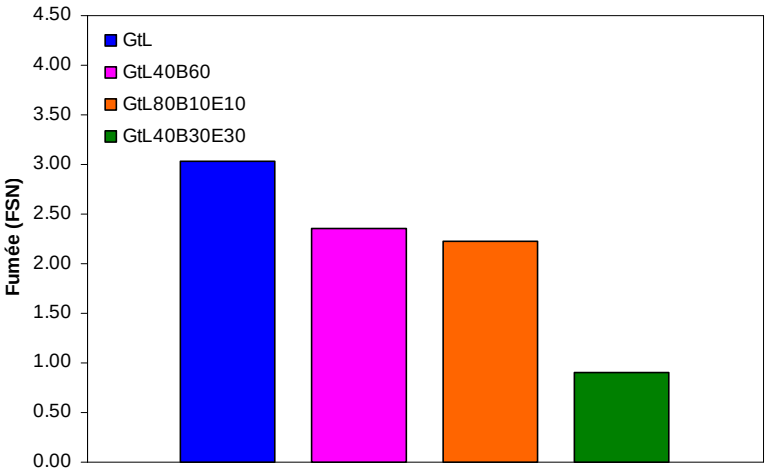



Figure V-30 : Influence de la composition du carburant sur les émissions de fumées (2000 tr/min, PMI=11 bar)

La Figure V-30 présente les émissions de fumées de chacun des carburants testés à ce point de fonctionnement. Afin de respecter la cible fixée pour les émissions de NOx (<1,5 g/kW.h), nous devons imposer un niveau de recirculation des gaz brûlés élevé qui entraine un niveau de fumée important pour le GtL. Les carburants GtL40B60 et Gtl80B10E10 génèrent une diminution quasi-équivalente des émissions de fumées par rapport au GtL. On ne voit donc pas un impact spécifique de l'éthanol sur la réduction des suies pour ce point de

fonctionnement. Enfin, le mélange fortement enrichi en éthanol entraine à nouveau une diminution importante du niveau de fumée.

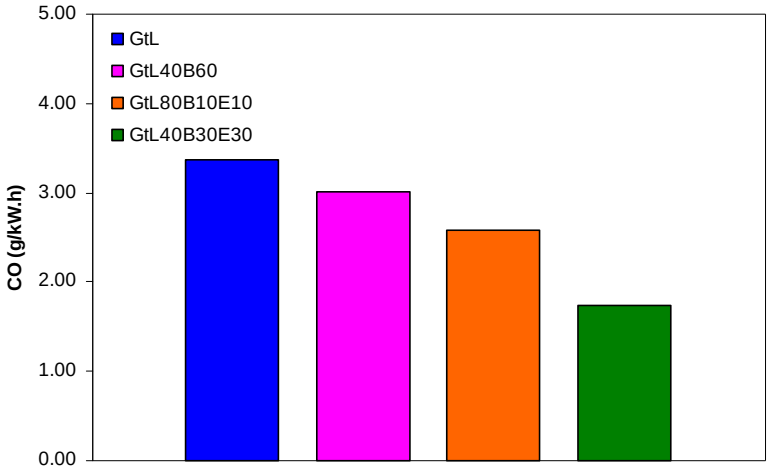



Figure V-31 : Influence de la composition du carburant sur les émissions de CO (2000 tr/min, PMI=11 bar)

En ce qui concerne le CO, on observe une diminution des émissions pour les mélanges oxygénés par rapport au GtL (cf. Figure V-31). Cette tendance est plus visible pour les mélanges contenant de l'éthanol. Ces résultats diffèrent de ceux observés pour les deux premiers points de fonctionnement et peuvent être expliqués comme suit : pour une charge plus importante, la température élevée dans le cylindre minimise l'impact de la forte chaleur latente de vaporisation de l'éthanol sur la température de flamme. De plus, la forte teneur en oxygène des mélanges contenant de l'éthanol permet une oxydation plus complète du CO ce qui explique la diminution des émissions de monoxyde de carbone avec les carburants enrichis en éthanol à mesure que la charge augmente. Ce phénomène a été observé dans plusieurs études [26,27,44,48,66,69].

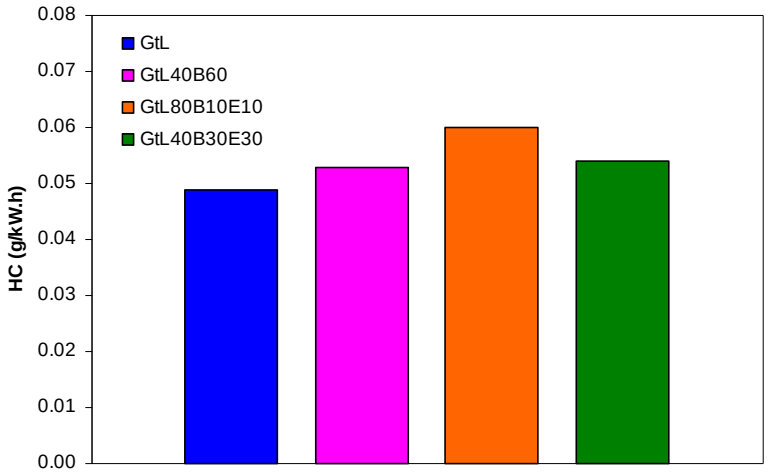



Figure V-32 : Influence de la composition du carburant sur les émissions de HC (2000 tr/min, PMI=11 bar)

Dans ces conditions moteur, les émissions de HC sont très faibles pour tous les carburants testés (cf. Figure V-32). On ne voit pas d'influence majeure de la composition du carburant sur les émissions.

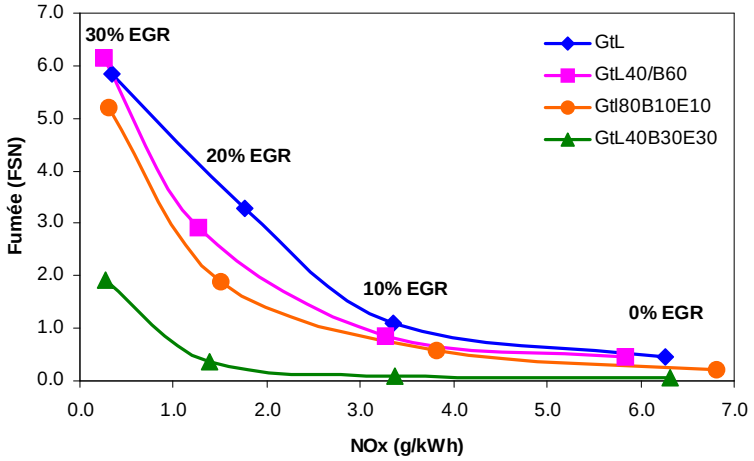



Figure V-33: Effet de l'EGR sur le compromis NOx/fumées pour les quatre carburants testés (2000 tr/min, PMI=11 bar)

La Figure V-33 présente les compromis NOx/fumées obtenus pour chacun des carburants testés à 2000 tr/min et pour une PMI de 11 bar en fonction du taux de recirculation des gaz brulés. Pour le GtL, l'augmentation du niveau d'EGR au-delà de 10% entraine un accroissement rapide des émissions de suie ce qui complique la maitrise des émissions de NOx. Le mélange GtL40B30E30 permet d'augmenter fortement le taux d'EGR sans pour autant générer un niveau de fumée important. Ce mélange permet donc l'obtention de compromis NOx/fumées très intéressants par rapport aux autres carburants.

### 6.2.2 Polluants non réglementés

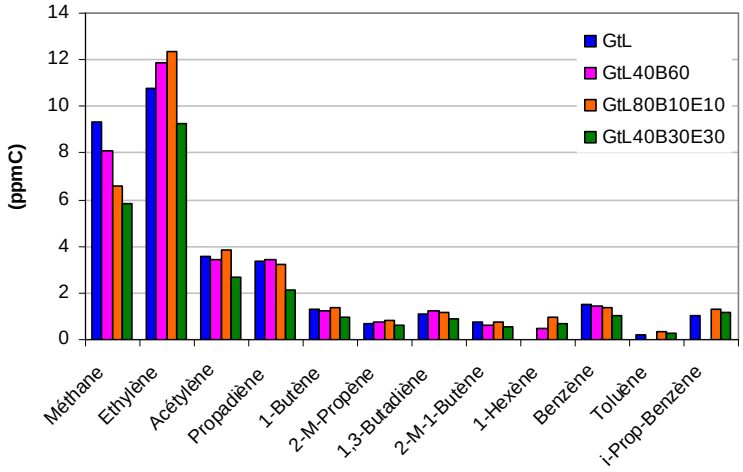



Figure V-34 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en HC $C_1$-$C_9$ à l'échappement (2000 tr/min, PMI=11 bar)

Les principaux hydrocarbures imbrûlés identifiés par chromatographie en phase gazeuse sur le point de fonctionnement optimisé des quatre carburants testés sont présentés sur la Figure V-34. Cette analyse confirme la diminution importante des émissions de HC pour tous les carburants déjà observée sur la baie 5 gaz pour ce point de fonctionnement (cf. Figure V-32).

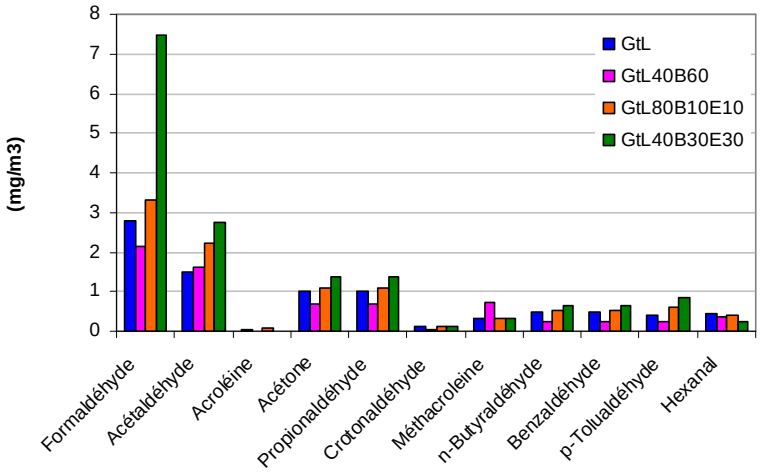



Figure V-35 : Influence de la composition du carburant sur les teneurs en aldéhydes et cétones à l'échappement (2000 tr/min, PMI=11 bar)

La Figure V-35 présente les principaux aldéhydes et cétones identifiés pour les quatre carburants testés à ce point de fonctionnement. Les quantités émises sont faibles comparativement aux autres points moteurs. On remarque une augmentation importante des émissions de formaldéhyde dans le cas du mélange GtL40B30E30. Cette augmentation peut être expliquée une post-oxydation moins efficace quand l'éthanol est présent dans le mélange.

On remarque également que, dans tous les cas de figures, les quantités d'aldéhyde mesurées en réacteur auto-agité sont bien plus importantes que celles obtenues sur moteur Diesel.

# 7. Conclusion

L'incorporation d'espèces oxygénées dans la formulation d'un carburant typé Diesel entraine des modifications importantes de l'initiation de la combustion ainsi que de la composition des gaz d'échappements. L'influence du carburant varie en fonction des conditions expérimentales.

A 1500 tr/min et 3 bar de PMI, l'utilisation d'un carburants fortement enrichi en éthanol entraine une augmentation importante du délai d'auto-inflammation. Cela se traduit par une combustion très tardive, ayant lieu dans la détente, entrainant une baisse importante du rendement de combustion. Une optimisation des réglages du moteur permet de recaler la combustion de ce type de carburant et d'obtenir des performances à peu près équivalentes à celles du GtL. Au niveau des émissions polluantes, on observe une augmentation des émissions de CO et d'HC due à la faible chaleur latente de vaporisation de l'éthanol qui diminue la température de combustion et favorise la formation de ces composés. En revanche, la forte teneur en oxygène permet de réduire la formation des suies. On observe également une augmentation importante des émissions de formaldéhyde et d'acétaldéhyde lorsque des mélanges enrichis en éthanol sont utilisés sur ce point de fonctionnement.

A 2500 tr/min et 6 bar de PMI, le faible indice de cétane des mélanges enrichis en éthanol entraine la mise en place d'une flamme de pré-mélange plus tardive et intense. Toutefois, les variations en termes d'émissions polluantes sont beaucoup plus modérées sur ce point de fonctionnement, ce qui témoigne d'une combustion de meilleure qualité dans ces conditions. Une optimisation des paramètres du moteur permet d'obtenir une réduction importante du niveau de fumée pour des émissions de NOx équivalentes même si les émissions d'hydrocarbures imbrûlés (surtout éthylène) et d'aldéhydes augmentent légèrement. Dans ces conditions, le facteur le plus difficile à optimiser semble être le bruit plutôt que les émissions polluantes.

A 2000 tr/min et 11 bar de PMI, la température élevée dans la chambre de combustion minimise l'impact de l'indice de cétane sur la combustion. Les mélanges enrichis en éthanol entrainent néanmoins une combustion plus intense et donc plus bruyante. Une optimisation des paramètres du moteur permet d'obtenir une diminution importante du niveau de fumée à iso-émission de NOx ainsi qu'une diminution des émissions de CO. Dans ces conditions, les émissions de formaldéhyde sont plus importantes pour les mélanges contenant de l'éthanol mais restent faibles malgré tout. A nouveau, le facteur limitant pour ce type de carburant sur ce point de fonctionnement semble être la gestion du bruit.

La comparaison des carburants des mélanges GtL60B40 et GtL80B10E10 ayant un indice de cétane et un rapport O/C massique très proches nous a permis de déterminer l'impact spécifique de l'éthanol sur la réduction du niveau de fumée. L'oxygène de la fonction alcool semble plus facilement mobilisable pour oxyder les suies que celui de la fonction ester. Cet effet est d'autant plus visible que le point moteur est chargé et que le taux de recirculation des gaz brûlés est important.

Cette étude a permis de mettre en exergue l'effet chimique de certaines espèces oxygénées incorporées dans la formulation d'un carburant typé gazole. Certaines tendances ont pu être expliquées à l'aide des observations effectuées lors de notre étude en réacteur auto-agité ou grâce aux prédictions du modèle cinétique mis au point au cours de ce travail de thèse. Néanmoins, le caractère fortement hétérogène de l'écoulement en moteur Diesel limite l'utilisation d'une approche zéro dimensionnelle pour interpréter les résultats obtenus au banc moteur. Une compréhension approfondie de la combustion de ces carburants complexes en moteur Diesel passe nécessairement par un couplage du mécanisme cinétique avec un code CFD afin de prendre en compte les effets de l'écoulement turbulent.

# Conclusion et perspectives

Comme nous l'avons vu, cette thèse s'inscrit dans un projet de recherche visant à évaluer l'impact de carburant de nouvelle génération sur la combustion et les émissions polluantes des moteurs Diesel. Parmi les formulations envisagées, les mélanges GtL/EMHC/éthanol semblent avoir un potentiel important. En effet, c'est un carburant alternatif ayant des propriétés physico-chimiques relativement proches de celles d'un gazole traditionnel. De plus, sa haute teneur en oxygène permet une réduction drastique des émissions de particules à l'échappement. Néanmoins, l'utilisation de ce type de mélanges en moteur Diesel nécessite une connaissance précise de la cinétique d'oxydation de ses différents constituants afin d'optimiser la combustion et de minimiser les émissions polluantes à l'échappement. L'objectif principal de cette thèse était donc de comprendre l'impact de la chimie du carburant sur la combustion et les émissions polluantes en moteur Diesel.

Dans un premier temps, une étude bibliographique approfondie nous a permis de sélectionner quatre espèces modèles représentatives des mélanges F-T/EMHC/éthanol : le n-décane, l'iso-octane, l'octanoate de méthyle et l'éthanol. Ces espèces modèles, combinées en proportions choisies, permettent la mise au point de carburants modèles possédant des caractéristiques thermodynamiques (volatilité, densité…) et chimiques (composition, indice de cétane…) proches de celles des carburants commerciaux, tout en conservant une composition chimique suffisamment simple pour garantir des temps de calcul raisonnables.

L'oxydation de mélanges binaires, ternaires et quaternaires de n-décane, d'iso-octane, d'octanoate de méthyle et d'éthanol a ensuite été étudiée en réacteur auto-agité. Les mélanges ont été choisis de manière à être représentatifs de carburants du type GtL, GtL/EMHC et GtL/EMHC/éthanol avec différentes teneurs en oxygénés. Les expériences ont été réalisées à haute pression (10 atm) pour un temps de passage de 1 s, trois richesses différentes (0,5 ; 1 et 2) et sur un large domaine de température (550-1150 K). L'analyse des échantillons par chromatographie en phase gazeuse nous a permis d'identifier et de quantifier les principaux produits et intermédiaires stables issus de l'oxydation des différents mélanges étudiés. Ces profils d'espèces viennent enrichir une base de données assez restreinte de résultats expérimentaux concernant l'oxydation de mélanges complexes alcanes/composés oxygénés et nous ont permis d'observer un impact fort de l'éthanol sur la réactivité du carburant, spécialement en milieu riche.

En complément à ce travail expérimental, nous avons effectué une étude théorique comprenant la construction et la validation d'un mécanisme cinétique détaillé capable de reproduire l'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol. Ce modèle quaternaire comprenant 2212 espèces et 9953 réactions est le résultat du couplage de quatre sous-mécanismes d'oxydation des espèces modèles considérés dans cette étude. La base $C_0$-$C_4$ de ce mécanisme est issue des travaux de Le Cong [144]. Certaines réactions dépendantes de la pression ont été réécrites selon le formalisme Troe afin de rendre le modèle plus souple et utilisable à toute pression. Nous avons ajouté à cette base un sous-mécanisme

d'oxydation du n-décane provenant des travaux de Diévart [159]. Les constantes de vitesse des réactions de décomposition des cétohydroperoxydes ont été modifiées afin de mieux simuler les délais d'auto-inflammation du n-décane à basse température. Les réactions relatives à l'oxydation de l'iso-octane proviennent des travaux de Mehl et al. [172]. Un sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle provenant des travaux de Togbé et al. [125] a également été ajouté. Enfin, le sous-mécanisme d'oxydation de l'éthanol a pour origine le modèle de Marinov [139] auquel ont été ajoutées des réactions de basse température [196]. Le mécanisme a été validé face à des résultats expérimentaux issus de la littérature pour l'oxydation de composés purs et de mélanges simples (délais d'auto-inflammation et profils d'espèces).

Les prédictions du modèle ont été confrontées à nos résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité. Globalement, les résultats issus des simulations reproduisent de manière satisfaisante nos résultats expérimentaux sur toute la gamme de richesse et de température testée. L'analyse du modèle nous a permis de connaitre les voies réactionnelles prépondérantes en fonction de la composition des mélanges. Les paramètres les plus sensibles des modèles et les réactions qui déterminent le comportement global du système chimique étudié ont également pu être dégagés.

Enfin, nous avons étudié la combustion de mélanges F-T, F-T/EMHC et F-T/EMHC/éthanol en moteur monocylindre Diesel. Cette phase d'essais, incluant une analyse approfondie des émissions non réglementées, nous a permis d'observer l'influence de la formulation des carburants sur l'initiation de la combustion et sur la composition des gaz d'échappements. A iso-réglage, l'utilisation de carburants enrichis en éthanol entraine une augmentation du délai d'auto-inflammation qui se traduit par une combustion de pré-mélange plus importante. Néanmoins, une optimisation des paramètres moteurs permet de recaler la combustion et d'obtenir des rendements quasi-identiques quel que soit le carburant. Au niveau des émissions polluantes, les principales observations de notre étude sont :

- Une baisse drastique du niveau de fumée pour les mélanges contenant une quantité importante d'oxygène. Notre étude semble montrer une efficacité légèrement supérieure de l'oxygène de la fonction alcool pour réduire les suies par rapport à celui de la fonction ester. Cet effet est d'autant plus visible que le point moteur est chargé et que le taux de recirculation des gaz brûlés est important.
- Une augmentation des émissions de formaldéhyde et d'acétaldéhyde pour les carburants enrichis en éthanol. Cet effet est surtout visible à faible charge et semble lié aux voies de décompositions majoritaires de l'éthanol ainsi qu'à une post-oxydation moins efficace pour ce type de carburant.
- Une légère augmentation des émissions d'hydrocarbures imbrûlés pour les mélanges contenant de l'éthanol sur tous les points de fonctionnements testés. Cette

augmentation peut être expliquée par la forte chaleur latente de vaporisation de l'éthanol qui fait décroitre la température de combustion et diminue le taux d'oxydation des HC.

- Une augmentation des émissions de CO à faible charge et une diminution sur les points plus fortement chargés. Cet effet peut être expliqué en deux temps : à faible charge la chaleur latente de vaporisation importante de l'éthanol entraine une diminution de la température de combustion qui se traduit par une oxydation moins efficace du CO. A forte charge en revanche, la température au sein du cylindre est suffisamment élevée pour permettre l'oxydation du CO et la grande quantité d'oxygène contenu dans les carburants enrichis en éthanol favorise encore cette oxydation.
- Aucune tendance nette n'a été observée concernant les émissions de NOx en fonction du type de carburant utilisé.

L'exploitation du schéma cinétique peut expliquer certaines tendances observées lors de notre étude au banc moteur. Pour autant, un travail important reste à accomplir afin de prédire de manière fiable l'impact de la formulation du carburant en combustion Diesel. A terme, il semble indispensable de coupler le modèle cinétique avec un code CFD afin de prendre en compte les effets de l'écoulement turbulent sur la combustion. Deux approches peuvent être envisagées pour parvenir à cet objectif :

- Une réduction du mécanisme cinétique et un couplage direct avec le code CFD.
- Une génération de tables contenant toute l'information issue du mécanisme cinétique détaillé nécessaire à la simulation (tabulation). Cela permet l'introduction de la chimie complexe dans le code CFD avec des temps de calcul raisonnables.

Il serait également intéressant d'intégrer au modèle quaternaire un sous-mécanisme permettant de simuler la formation des suies afin de mieux comprendre l'impact de l'éthanol sur la réduction des émissions de particules observé lors de nos essais moteurs.

# Références Bibliographiques

[1] **U.S.Energy Information Administration** (2010) : *International Energy Outlook*, DOE/EIA-0484, www.eia.gov/oiaf/ieo/index.html.

[2] **Ballerini D.** (2007) : *Le plein de biocarburant?*, édité par TECHNIP, Paris.

[3] **Ballerini D.** (2006) : *Les biocarburants: état des lieux, perspectives et enjeux de développement*, édité par TECHNIP, Paris.

[4] **Pachaury R.K., Reisinger A., Equipe de rédaction principale** (2007) : *GIEC: Bilan 2007 des changements climatiques. Contribution des groupes de travail I, II et III au quatrième rapport d'évaluation d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat*, Genève, ISBN 92-9169-222-0.

[5] **CCNUCC** (1998) : *Kyoto protocol to the united nations framework convention on climate change*, http://unfccc.int/resource/docs/convkp/kpeng.pdf.

[6] **Journal Officiel de l'Union Européenne** (2009) : *Directive du Parlement Européen et du conseil du 23 avril 2009 relative à la promotion de l'utilisation de l'énergie produite à partir de sources renouvelables*, Paris, 2009/28/CE.

[7] **CITEPA** (2011) : *Inventaire des émissions de polluants atmosphériques et de gaz atmosphérique en France - séries sectorielles et analyses étendues*, Format SECTEN, www.citepa.org/publications/inventaires.htm.

[8] **Journal Officiel de l'Union Européenne** (2012) : *Règlement du parlement Européen et du conseil du 20 juin 2007 relatif à la réception des véhicules à moteur en regard des émissions des véhicules particuliers et utilitaires légers (Euro 5 et Euro 6) et aux informations sur la réparation et l'entretien des véhicules*, 2007/715/CE.

[9] **Balat M., Balat H., Öz C.** (2008) : *Progress in bioethanol processing*, Progress in Energy and Combustion Science, vol. 34, pp. 551-573.

[10] **Agarwal A.K.** (2007) : *Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines*, Progress in Energy and Combustion Science, vol. 33, pp. 233-271.

[11] **Murugesan A., Umarani C., Chinnusamy T.R., Krishnan M., Subramanian R., Neduzchezhain N.** (2009) : *Production and analysis of bio-diesel from non-edible oils - a review*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 13, pp. 825-834.

[12] **Demirbas A.** (2009) : *Progress and recent trends in biodiesel fuels*, Energy Conversion and Management, vol. 50, pp. 14-34.

[13] **Poitrat E.** (1999) : *Biocarburants*, Techniques de l'ingénieur, BE-8-550.

[14] **Broust F., Girard P., Van De Steene L.** (2008) : *Biocarburants de seconde génération*, Techniques de l'ingénieur, RE-110.

[15] **Shahid E.M., Jamal Y.** (2008) : *A review of biodiesel as vehicular fuel*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 12, pp. 2484-2494.

[16] **Union Francaise des Industries Pétrolières** (2012) : http://www.ufip.fr/.

[17] **Haupt D., Nord K., Egebäck K.E., Ahlvik P.** (2004) : *Hydrocarbons and aldehydes from a diesel engine running on ethanol and equipped with EGR, catalyst and DPF*, SAE Paper, 2004-01-1882.

[18] **Haupt D., Nord K., Tingvall B., Ahlvik P., Egebäck K.E., Andersson S., Blomquist M.** (2004) : *Invastigating the potential to obtain low emissions from a diesel engine running on ethanol and equipped with EGR, catalyst and DPF*, SAE Paper, 2004-01-1884.

[19] **Haupt D., Nord K.** (2009) : *Aftertreatment strategy for reducing emissions from an ethanol fueled CI engine*, SAE Paper, 2009-01-1949.

[20] **Abu-Qudais M., Haddad O., Qudaisat M.** (2000) : *The effect of alcohol fumigation on diesel engine performance and emissions*, Energy Conversion and Management, vol. 41, pp. 389-399.

[21] **Ajav E.A., Singh B., Bhattacharya T.K.** (1998) : *Performance of a stationary diesel engine using vapourized ethanol as supplementary fuel,* Biomass and Bioenergy, vol. 15, pp. 493-502.

[22] **Noguchi N., Terao H., Sakata C.** (1996) : *Performance improvement by control of flow rates and diesel injection timing on dual fuel-engine with ethanol,* Bioresource Technology, vol. 56, pp. 35-39.

[23] **Hansen A.C., Lyne P.W.L., Zhang Q.** (2001) : *Ethanol-diesel blends: a step towards a bio-based fuel for diesel engine,* ASAE Paper, 01-6048.

[24] **Hansen A.C., Zhang Q., Lyne P.W.L.** (2005) : *Ethanol-diesel fuel blends: a review,* Bioresource Technology, vol. 96, pp. 277-285.

[25] **McCormick R.L., Parish R.** (2001) : *Technical barriers to the use of ethanol in diesel fuel,* National Renewable Energy Laboratory, NREL/MP-540-32674.

[26] **Huang J., Wang Y., Li S., Roskilly A.P., Yu H., Li H.** (2009) : *Experimental investigation on the performance and emissions of a diesel engine fuelled with ethanol-diesel blends,* Applied Thermal Engineering, vol. 29, pp. 2484-2490.

[27] **Guarieiro L.L.N., de Souza A.F., Torres E.A., de Andrade J.B.** (2009) : *Emission profile of 18 carbonyl compounds, CO, CO2 and NOx emitted by a diesel engine fuelled with diesel and ternary blends containing diesel, ethanol and biodiesel or vegetable oils,* Atmospheric Environment, vol. 43, pp. 2754-2761.

[28] **Reyes Y., Aranda D.A.G., Santander L.A.M., Cavado A., Belchior C.R.P.** (2009) : *Action principle of cosolvent additives in ethanol-diesel blends: stability studies,* Energy & Fuels, vol. 23, pp. 2731-2735.

[29] **Fernando S., Hanna M.** (2004) : *Development of a novel biofuel blend using ethanol-biodiesel-diesel microemulsions: EB-Diesel,* Energy & Fuels, vol. 18, pp. 1695-1703.

[30] **Can Ö., Celikten I., Usta N.** (2004) : *Effects of ethanol addition on performance and emissions of a turbocharged indirect injection diesel engine running at different injection pressures,* Energy Conversion and Management, vol. 45, pp. 2429-2440.

[31] **Mohammadi A., Ishiyama T., Kawanabe H., Horibe N.** (2004) : *An optimal usage of recent combustion control technologies for DI diesel engine operating on ethanol blended fuels,* SAE Paper, 2004-01-1866.

[32] **Mohammadi A., Kee S.S., Ishiyama T., Kakuta T., Matsumoto T.** (2005) : *Implementation of ethanol diesel blend fuels in PCCI combustion,* SAE Paper, 2005-01-3712.

[33] **Mohammadi A., Ishiyama T., Kakuta T., Kee S.S.** (2005) : *Fuel injection strategy for clean diesel engine using ethanol blended fuel,* SAE Paper, 2005-01-1725.

[34] **Di Y., Cheung C.S., Huang Z.** (2009) : *Comparison of the effect of biodiesel-diesel and ethanol-diesel on the gaseous emission of a direct-injection diesel engine,* Atmospheric Environment, vol. 43, pp. 2721-2730.

[35] **Di Y., Cheung C.S., Huang Z.** (2009) : *Comparison of the effect of biodiesel-diesel and ethanol-diesel on the particulate emissions of a direct injection diesel engine,* Aerosol Science and Technology, vol. 43, pp. 455-465.

[36] **Di Y., Cheung C.S., Huang Z.** (2009) : *Experimental study on particulate emission of a diesel engine fueled with blended ethanol-dodecanol-diesel,* Aerosol Science, vol. 40, pp. 101-112.

[37] **Kim H., Choi B.** (2008) : *Effect of ethanol-diesel blend fuels on emission and particle size distribution in a common-rail direct injection diesel engine with warm-up catalytic converter,* Renewable Energy, vol. 33, pp. 2222-2228.

[38] **Zhang R.D., He H., Shi X.Y., Zhang C.B., He B.Q., Wang J.X.** (2004) : *Preparation and emission characteristics of ethanol-diesel fuel blends,* Journal of Environmental Sciences, vol. 16, pp. 793-796.

[39] **Chandra R., Kumar R.** (2007) : *Fuel properties of some stable alcohol-diesel microemulsions for their use in compression ignition engines,* Energy & Fuels, vol. 21, pp. 3410-3414.

[40] **Kumar C., Athawe M., Aghav Y.V., Babu M.K.G., Das L.M.** (2007) : *Effects of ethanol addition on performance, emission and combustion of DI diesel engine running at different injection pressures,* SAE Paper, 2007-01-0626.

[41] **Ali Y., Hanna M., Borg J.** (1995) : *Optimization of diesel, methyl tallowate and ethanol blend for reducing emissions from diesel engine,* Bioresource Technology, vol. 52, pp. 237-243.

[42] **Ali Y., Eskridge K.M., Hanna M.** (1995) : *Testing of alternative diesel fuel from tallow and soybean oil in cummins N14-410 diesel engine,* Bioresource Technology, vol. 53, pp. 243-254.

[43] **Chen H., Wang J.X., Shuai S.J., An X.L., Chen W.M.** (2006) : *Effects of ethanol in ester-ethanol-diesel blended fuels on spray behavior and PM emission,* SAE Paper, 2006-01-0236.

[44] **Chen H., Shuai S.J., Wang J.X.** (2007) : *Study on combustion characteristics and PM emission of diesel engines using ester-ethanol-diesel blended fuels,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 31, pp. 2981-2989.

[45] **Chen H., Wang J., Shuai S., Wenmiao C.** (2008) : *Study of oxygenated biomass fuel blends on a diesel engine,* Fuel, vol. 87, pp. 3462-3468.

[46] **Kim H., Choi B.** (2010) : *The effect of biodiesel and bioethanol blended diesel fuel on nanoparticles and exhaust emissions from CRDI diesel engine,* Renewable Energy, vol. 35, pp. 157-163.

[47] **Pang X., Shi X., Mu Y., He H., Shuai S., Chen H., Li R.** (2006) : *Characteristics of carbonyl compounds emission from a diesel engine using biodiesel-ethanol-diesel as fuel,* Atmospheric Environment, vol. 40, pp. 7057-7065.

[48] **Pang X., Mu Y., Yuan J., He H.** (2008) : *Carbonyls emission from ethanol-blended gasoline and biodiesel-ethanol-diesel used in engines,* Atmospheric Environment, vol. 42, pp. 1349-1358.

[49] **Shi X., Pang X., Mu Y., He H., Shuai S., Wang J., Chen H., Li R.** (2006) : *Emission reduction potential of using ethanol-biodiesel-diesel fuel blend on a heavy-duty diesel engine,* Atmospheric Environment, vol. 40, pp. 2567-2574.

[50] **Shi X., Yu Y., He H., Shuai S., Dong S., Li R.** (2008) : *Combination of biodiesel-ethanol-diesel fuel blend and SCR catalyst assembly to reduce emissions from a heavy-duty diesel engine,* Journal of Environmental Sciences, vol. 20, pp. 177-182.

[51] **Shudo T., Fujibe A., Kazahaya M., Aoyagi Y., Ishii H., Goto Y., Noda A.** (2005) : *The cold flow performance and the combustion characteristics with ethanol blended biodiesel fuel,* SAE Paper, 2005-01-3707.

[52] **Satgé de Caro P., Mouloungui Z., Vaitilingom G., Berge J.C.** (2001) : *Interest of combining an additive with diesel-ethanol blends for use in diesel engines,* Fuel, vol. 80, pp. 565-574.

[53] **Ahmed I.** (2001) : *Oxyganated diesel: emissions and performance characteristics of ethanol-diesel blends in CI engines,* SAE Paper, 2001-01-2475.

[54] **Armas O., Lapuerta M., Mata C., Pérez D.** (2009) : *Online emissions from a vibrating roller using a ethanol-diesel blend during a railway construction,* Energy & Fuels, vol. 23, pp. 2989-2996.

[55] **Cole R.L., Poola R.B., Sekar R., Schaus J.E., McPartlin P.** (2001) : *Effects of ethanol additives on diesel particulate and NOx emissions,* SAE Paper, 2001-01-1937.

[56] **Kass M.D., Thomas J.F., Storey J.M., Domingo N., Wade J., Kenreck G.** (2001) : *Emissions from a 5.9 liter diesel engine fueled with ethanol diesel blends,* SAE Paper, 2001-01-2018.

[57] **Lapuerta M., Armas O., García-Contreras R.** (2007) : *Stability of diesel-bioethanol blends for use in Diesel engines,* Fuel, vol. 86, pp. 1351-1357.

[58] **Rakopoulos C.D., Antonopoulos K.A., Rakopoulos D.C.** (2007) : *Experimental heat release analysis and emissions of a HSDI diesel engine fueled with ethanol-diesel fuel blend,* Energy, vol. 32, pp. 1791-1808.

[59] **Rakopoulos C.D., Antonopoulos K.A., Rakopoulos D.C., Hountalas D.T., Andritsakis E.C.** (2007) : *Study of the performance and emissions of a high-speed direct injection diesel engine operating on ethanol-diesel fuel blend,* International Journal of Alternative Propulsion, vol. 1, pp. 309-324.

[60] **Rakopoulos C.D., Antonopoulos K.A., Rakopoulos D.C., Hountalas D.T.** (2008) : *Multi-zone modeling of combustion and emissions formation in DI diesel engine operating on ethanol-diesel fuel blends,* Energy Conversion and Management, vol. 49, pp. 625-643.

[61] **Rakopoulos D.C., Rakopoulos C.D., Giakoumis E.G., Papagiannakis R.G., Kyritsis D.C.** (2008) : *Experimental stochastic investigation of the combustion cyclic variability in HSDI diesel engine using ethanol-diesel fuel blends,* Fuel, vol. 87, pp. 1478-1491.

[62] **Rakopoulos D.C., Rakopoulos C.D., Kakaras E.C., Giakoumis E.G.** (2008) : *Effects of ethanol-diesel fuel blends on the performance and exhaust emissions of heavy duty DI diesel engine,* Energy Conversion and Management, vol. 49, pp. 3155-3162.

[63] **Ribeiro N.M., Pinto A.C., Quintella C.M., da Rocha G.O., Teixeira L.S.G., Guarieiro L.L.N., do Carmo Rangel M., Veloso M.C.C., Rezende M.J.C., da Cruz R.S., de Oliveira A.M., Torres E.A., de Andrade J.B.** (2007) : *The role of additives for diesel and diesel blended (ethanol or biodiesel) fuels: a review,* Energy & Fuels, vol. 21, pp. 2433-2445.

[64] **Shi X., Yu Y., He H., Shuai S., Wang J., Li R.** (2005) : *Emission characteristics using methyl soyate-ethanol-diesel fuel blends on a diesel engine,* Fuel, vol. 84, pp. 1543-1549.

[65] **Chotwichien A., Luengnaruemitchai A., Jai-In S.** (2009) : *Utilization of palm oil esters as an additive in ethanol-diesel and butanol-diesel blends,* Fuel, vol. 88, pp. 1618-1624.

[66] **Kwanchareon P., Luengnaruemitchai A., Jai-In S.** (2007) : *Solubility of a diesel-biodiesel-ethanol blend, its fuel properties and its emission characteristics from diesel engine,* Fuel, vol. 86, pp. 1053-1061.

[67] **Lapuerta M., Armas O., Garcia-Contreras R.** (2009) : *Effect of ethanol on blending stability and diesel engine emissions,* Energy & Fuels, vol. 23, pp. 4343-4354.

[68] **Guibet J.C.** (1997) : *Carburants et moteurs T1,* édité par TECHNIP, Paris.

[69] **Li D.G., Huang Z., Lü X.C., Zhang W.G., Yang J.G.** (2005) : *Physico-chemical properties of ethanol-diesel blend fuel and its effect on performance and emissions of diesel engines,* Renewable Energy, vol. 30, pp. 967-976.

[70] **Barabás I., Todorut A.I.** (2009) : *Key fuel properties of biodiesel-diesel fuel-ethanol blends,* SAE Paper, 2009-01-1810.

[71] **Corkwell K.C., Jackson M.M.** (2002) : *Lubricity and injector pump wear issues with E-Diesel fuel blends,* SAE Paper, 2002-01-2849.

[72] **Pantar A.V., Corkwell K.C.** (2004) : *E-Diesel: a viable alternative fuel,* SAE Paper, 2004-28-0074.

[73] **He B.Q., Shuai S.J., Wang J.X., He H.** (2003) : *The effect of ethanol blended diesel fuels on emissions from a diesel engine,* Atmospheric Environment, vol. 37, pp. 4965-4971.

[74] **L. Pidol, B. Lecointe, et N. Jeuland** (2008) : *Ethanol as a diesel base fuel: an engine evaluation and optimization.*

[75] **Pidol L., Lecointe B., Pesant L., Jeuland N.** (2008) : *Ethanol as a diesel base fuel - potential in HCCI mode,* SAE Paper, 2008-01-2506.

[76] **Pidol L., Lecointe B., Jeuland N.** (2009) : *Ethanol as a diesel base fuel: Managing the flash point issue - consequences on engine behavior,* SAE Paper, 2009-01-1807.

[77] **Ajav E.A., Singh B., Bhattacharya T.K.** (1999) : *Experimental study of some performance parameters of a constant speed stationary diesel engine using ethanol-diesel blends as fuel,* Biomass and Bioenergy, vol. 17, pp. 357-365.

[78] **Lü X.C., Huang Z., Zhang W.G., Li D.G.** (2004) : *The influence of ethanol additives on the performance and combustion characteristics of diesel engines,* Combustion Science and Technology, vol. 176, pp. 1309-1329.

[79] **Bilgin A., Durgun O., Sahin Z.** (2002) : *The effect of diesel-ethanol blends on diesel engine performance,* Energy Sources, vol. 24, pp. 431-440.

[80] **Lapuerta M., Armas O., Herreros J.M.** (2008) : *Emissions from a diesel-bioethanol blend in an automotive diesel engine,* Fuel, vol. 87, pp. 25-31.

[81] **Lü X.C., Yang J.G., Zhang W.G., Huang Z.** (2004) : *Effect of cetane number improver on heat release rate and emissions of hight speed diesel engine fueled with ethanol-diesel blend fuel,* Fuel, vol. 83, pp. 2013-2020.

[82] **Sahin Z., Durgun O.** (2009) : *Prediction of the effects of ethanol-diesel fuel blends on diesel engine performance characteristics, combustion, exhaust emissions and cost,* Energy & Fuels, vol. 23, pp. 1707-1717.

[83] **Song C.L., Zhou Y.C., Huang R.J., Wang Y.Q., Huang Q.F., Lü G., Liu K.M.** (2007) : *Influence of ethanol-diesel blended fuels on diesel exhaust emissions and mutagenic and genotoxic activities of particulate extracts,* Journal of Hazardous Materials, vol. 149, pp. 355-363.

[84] **McEnally C.S., Pfefferle L.D., Atakan B., Kohse-Höinghaus K.** (2006) : *Studies of aromatic hydrocarbon formation mechanisms in flames: progress toward closing the fuel gap,* Progress in Energy and Combustion Science, vol. 32, pp. 247-294.

[85] **Richter H., Howard J.B.** (2000) : *Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and their growth to soot - a review of chemical reaction pathways,* Progress in Energy and Combustion Science, vol. 26, pp. 565-608.

[86] **Annals of the ICRP** (1994) : *Human respiratory tract model for radiological protection.*

[87] **Choi C.Y., Reitz R.D.** (1999) : *An experimental study on the effects of oxyganated fuel blends and multiple injection strategies on DI diesel engine emissions,* Fuel, vol. 78, pp. 1303-1317.

[88] **Pepiot-Desjardins P., Pitsch H., Malhotra R., Kirby S.R., Boehman A.L.** (2008) : *Structural group analysis for soot reduction tendency of oxyganated fuels,* Combustion and Flame, vol. 154, pp. 191-205.

[89] **Westbrook C.K., Pitz W.J., Curran H.J.** (2006) : *Chemical kinetic modeling study of the effects of oxygenated hydrocarbons on soot emissions from diesel engines,* Journal of Physical Chemistry A, vol. 110, pp. 6912-6922.

[90] **Battin-leclerc F.** (2008) : *Detailled chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates,* Progress in Energy and Combustion Science, vol. 34, pp. 440-498.

[91] **Pitz W.J., Cernansky N.P., Egolfopoulos F.N., Farell J.T., Friend D.G., Pitsch H.** (2007) : *Development of an experimental database and kinetic models for surrogate gasoline fuels,* SAE Paper, 2007-01-0175.

[92] **Pitz W.J., Mueller C.J.** (2011) : *Recent Progress in the development of diesel surrogate fuel,* Progress in Energy and Combustion Science, vol. 37, pp. 330-350.

[93] **Dagaut P., Cathonnet M.** (2006) : *The ignition, oxidation and combustion of kerosene: a review of experimental and kinetic modeling,* Progress in Energy and Combustion Science, vol. 32, pp. 48-92.

[94] **Mzé-Ahmed A., Hadj-Ali K., Diévart P., Dagaut P.** (2010) : *Kinetics of oxidation of a synthetic jet fuel in a jet-stirred reactor: experimental and modeling study,* Energy & Fuels, vol. 24, pp. 4904-4911.

[95] **Dagaut P., Gaïl S., Sahasrabudhe M.** (2007) : *Rapeseed oil methyl ester oxidation over extended ranges of pressure, temperature and equivalence ratio: experimental and modeling kinetic study,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 31, pp. 2955-2961.

[96] **Biet J., Warth V., Herbinet O., Glaude P.A., Battin-leclerc F.** (2009) : *Modeling study of the low-temperature oxidation of large methyl esters,* Proceedings of the European combustion meeting.

[97] **Ramirez H.P., Fikri M., Cancino L.R., Moréac G., Schulz C., Dagaut P.** (2012) : *Autoignition of surrogate biodiesel fuel (B30) at high pressures: experimental and modeling kinetic study,* Combustion and Flame, vol. 159, pp. 996-1008.

[98] **Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., Westbrook C.K.** (1998) : *A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation,* Combustion and Flame, vol. 114, pp. 149-177.

[99] **Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., Westbrook C.K.** (2002) : *A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation,* Combustion and Flame, vol. 129, pp. 253-280.

[100] **Diévart P.** (2008) : *Oxydation et combustion en milieu ultra pauvre de carburants types gazoles - étude expérimentale en réacteur agité et modélisation,* Thèse, Université de Lille 1.

[101] **Ristori A.** (2000) : *Modélisation de la combustion du gazole - étude des aspects chimiques,* Thèse, Université d'Orléans.

[102] **Piperel A.** (2008) : *Impact des propriétés des gaz d'échappement recyclés sur l'initiation et le déroulement de la combustion : caractérisation paramétrique de la réactivité de l'EGR,* Thèse, Université d'Orléans.

[103] **Simmie J.M.** (2003) : *Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels,* Progress in Energy and Combustion Science, vol. 29, pp. 599-634.

[104] **Glaude P.A., Battin-leclerc F., Fournet R., Warth V., Côme G.M., Scacchi G.** (2000) : *Construction and simplification of model for the oxidation alkanes,* Combustion and Flame, vol. 122, pp. 462.

[105] **Kohse-Höinghaus K., Obwald P., Cool T.A., Kasper T., Hansen N., Qi F., Westbrook C.K., Westmoreland P.R.** (2010) : *Biofuel combustion chemistry: from ethanol to biodiesel,* Angewandte Chemie International Edition, vol. 49, pp. 3572-3597.

[106] **Osmont A., Catoire L., Gökalp I., Swihart M.T.** (2007) : *Thermochemistry of C-C and C-H bond breaking in fatty acid methyl esters,* Energy & Fuels, vol. 21, pp. 2027-2032.

[107] **Osmont A., Yahyaoui M., Catoire L., Gökalp I., Swihart M.T.** (2008) : *Thermochemistry of C-O, (CO)-O and (CO)-C bond breaking in fatty acid methyl esters,* Combustion and Flame, vol. 155, pp. 334-342.

[108] **Lai J.Y.W., Lin K.C., Violi A.** (2010) : *Biodiesel combustion: advances in chemical kinetic modeling,* Progress in Energy and Combustion Science.

[109] **Fisher E.M., Pitz W.J., Curran H.J., Westbrook C.K.** (2000) : *Detailled chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 28, pp. 1579-1586.

[110] **Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., Westbrook C.K.** (1998) : *A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation,* Combustion and Flame, vol. 114, pp. 149-177.

[111] **Gail S., Thomson M.J., Sarathy S.M., Syed S.A., Dagaut P.** (2007) : *A wide range kinetic modeling study of methyl butanoate combustion,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 31, pp. 305-311.

[112] **Metcalfe W.K., Dooley S., Curran H.J., Simmie J.M., El-Nahas A.M., Navarro M.V.** (2007) : *Experimental and modeling study of C5H10O2 ethyl and methyl esters,* Journal of Physical Chemistry A, vol. 111, pp. 4001-4014.

[113] **El-Nahas A.M., Navarro M.V., Simmie J.M., Bozzelli J.W., Curran H.J., Dooley S., Metcalfe W.K.** (2007) : *Enthalpies of formation, bond dissociation energies and reaction paths for the decomposition of model biofuels: ethyl propanoate and methyl butanoate,* Journal of Physical Chemistry A, vol. 111, pp. 3727-3739.

[114] **Dooley S., Curran H.J., Simmie J.M.** (2008) : *Autoignition measurements and a validated kinetic model for the biodiesel surrogate, methyl butanoate,* Combustion and Flame, vol. 153, pp. 2-32.

[115] **Huynh L.K., Violi A.** (2008) : *Thermal decomposition of methyl butanoate: ab initio study of a biodiesel fuel surrogate,* Journal of Organic Chemistry, vol. 73, pp. 94-101.

[116] **Farooq A., Davidson D.F., Hanson R.K., Huynh L.K., Violi A.** (2009) : *An experimental and computational study of methyl ester decomposition pathways using shock tubes,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 32, pp. 247-253.

[117] **Sarathy S.M., Gail S., Syed S.A., Thomson M.J., Dagaut P.** (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, vol. 31, pp. 1015-1022.

[118] **Gail S., Sarathy S.M., Thomson M.J., Diévart P., Dagaut P.** (2008) : *Experimental and chemical kinetic modeling study of small methyl esters oxidation: methyl-2-butenoate and methyl butanoate,* Combustion and Flame, vol. 155, pp. 635-650.

[119] **Bennadji H., Biet J., Coniglio-Jaubert L., Billaud F., Glaude P.A., Battin-leclerc F.** (2009) : *Experimental autoignition of C4-C6 saturated and unsaturated methyl and ethyl esters,* Proceedings of the European combustion meeting.

[120] **Zhang Y., Yang Y., Boehman A.L.** (2009) : *Premixed ignition behavior of C9 fatty acid esters: a motored engine study,* Combustion and Flame.

[121] **Walton S.M., Wooldridge M.S., Westbrook C.K.** (2009) : *An experimental investigation of structural effects on the auto-ignition properties of two C5 esters,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 32, pp. 262.

[122] **Hakka M.H., Bennadji H., Biet J., Yahyaoui M., Sirjean B., Warth V., Coniglio O., Herbinet O., Glaude P.A., Billaud F., Battin-leclerc F.** (2010) : *Oxidation of methyl and ethyl butanoates,* International Journal of Chemical Kinetics, vol. 42, pp. 226-252.

[123] **Dayma G., Gaïl S., Dagaut P.** (2008) : *Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate,* Energy & Fuels, vol. 22, pp. 1469-1479.

[124] **Dayma G., Togbé C., Dagaut P.** (2009) : *Detailed kinetic mechanism for the oxidation of vegetable oil methyl esters: new evidence from methyl heptanoate,* Energy & Fuels.

[125] **Togbé C., May-Carle J.B., Dayma G., Dagaut P.** (2010) : *Chemical kinetic study of the oxidation of a biodiesel-bioethanol surrogate fuel: methyl octanoate-ethanol mixtures,* Journal of Physical Chemistry A, vol. 114, pp. 3896-3908.

[126] **Herbinet O., Pitz W.J., Westbrook C.K.** (2008) : *Detailed chemical kinetic oxidation mechanism for a biodiesel surrogate,* Combustion and Flame, vol. 154, pp. 507-528.

[127] **Dagaut P., Gaïl S., Sahasrabudhe M.** (2007) : *Rapeseed oil methyl ester oxidation over extended ranges of pressure, temperature and equivalence ratio: experimental and modeling kinetic study,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 31, pp. 2955-2961.

[128] **Seshadri K., Lu T., Herbinet O., Humer S., Niemann U., Pitz W.J., Seiser R., Law C.K.** (2009) : *Experimental and kinetic modeling of extinction and ignition of methyl decanoate in laminar non-premixed flows,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 32, pp. 1067-1074.

[129] **Herbinet O., Pitz W.J., Westbrook C.K.** (2010) : *Detailled chemical kinetic mechanism for the oxidation of biodiesel fuels blend surrogate,* Combustion and Flame, vol. 157, pp. 893-908.

[130] **Diévart P., Won S.H., Dooley S., Dryer F.L., Ju Y.** (2012) : *A kinetic model for methyl decanoate combustion,* Combustion and Flame, vol. 159, pp. 1793-1805.

[131] **Grana R., Frassoldati A., Cuoci A., Faravelli T., Ranzi E.** (2012) : *A wide range kinetic modeling study of pyrolisis and oxidation of methyl butanoate and methyl decanoate. Note I : lumped kinetic model of methyl butanoate and small methyl esters,* Energy, pp. 1-16.

[132] **Grana R., Frassoldati A., Saggese C., Faravelli T., Ranzi E.** (2012) : *A wide range kinetic modeling study of pyrolisis and oxidation of methyl butanoate and methyl decanoate. Note II : lumped kinetic model of decomposition and combustion of methyl esters up to methyl decanoate,* Combustion and Flame.

[133] **Glaude P.A., Herbinet O., Bax S., Biet J., Westbrook C.K., Battin-leclerc F.** (2010) : *Modeling of the oxidation of methyl esters - validation for methyl hexanoate, methyl heptanoate and methyl decanoate in a jet-stirred reactor,* Combustion and Flame.

[134] **Biet J., Warth V., Herbinet O., Glaude P.A., Battin-leclerc F.** (2009) : *Modeling study of the low-temperature oxidation of large methyl esters,* Proceedings of the European combustion meeting.

[135] **Hakka M.H., Glaude P.A., Herbinet O., Battin-leclerc F.** (2009) : *Experimental study of the oxidation of large surrogates for diesel and biodiesel fuels,* Combustion and Flame, vol. 156, pp. 2129-2144.

[136] **Bax S., Hakka M.H., Glaude P.A., Herbinet O., Battin-leclerc F.** (2010) : *Experimental study of the oxidation of methyl oleate in jet stirred reactor,* Combustion and Flame, vol. 157, pp. 1220-1229.

[137] **Herbinet O., Biet J., Hakka M.H., Warth V., Glaude P.A., Nicolle A., Battin-leclerc F.** (2011) : *Modeling study of the low temperature oxidation of large methyl esters from C11 to C19,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 33, pp. 391-398.

[138] **Westbrook C.K., Naik C.V., Herbinet O., Pitz W.J., Mehl M., Sarathy S.M., Curran H.J.** (2011) : *Detailed chemical kinetic reaction mechanisms for soy and rapeseed biodiesel fuels,* Combustion and Flame, vol. 158, pp. 742-755.

[139] **Marinov N.M.** (1999) : *A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation,* International Journal of Chemical Kinetics, vol. 31, pp. 183-220.

[140] **Saxena P., Williams F.A.** (2007) : *Numerical and experimental studies of ethanol flames,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 31, pp. 1149-1156.

[141] **Konnov A.A.** (2009) : *Implementation of the NCN pathway of prompt-NO formation in the detailed reaction mechanism,* Combustion and Flame, vol. 156, pp. 2093-2105.

[142] **Hughes K.J., Turanyi T., Clague A.R., Pilling M.J.** (2001) : *Developpement and testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane,* International Journal of Chemical Kinetics, vol. 33, pp. 513-538.

[143] **Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., Moriarty N.W., Eiteneer B., Goldenberg C., Bowman C.T., Hanson R.K., Song S., Gardiner W.C., Lissiansky V.V., Quin Z.** (2000) : *Gri-Mech 3.0,* http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.

[144] **Le Cong T.** (2007) : *Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de combustibles gazeux: méthane, gaz naturel et mélanges contenant de l'hydrogène, du CO, du CO2 et de l'eau,* Thèse, Université d'Orléans.

[145] **Delfau J.L., Bouhria M., Reuillon M., Sanogo O., Akrich R., Vovelle C.** (1990) : *Experimental and computational investigation of the structure of a sooting decane/O2/Ar flame,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 23, pp. 1567-1572.

[146] **Dagaut P., Reuillon M., Cathonnet M.** (1994) : *High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature.3.n-decane,* Combustion Science and Technology, vol. 103, pp. 349-359.

[147] **Nehse M., Warnatz J., Chevalier C.** (1996) : *Kinetic modeling of the oxidation of large aliphatic hydrocarbons,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 26, pp. 773-780.

[148] **Douté C., Delfau J.L., Vovelle C.** (1997) : *Modeling of the structure of a premixed n-decane flame,* Combustion Science and Technology, vol. 130, pp. 269-313.

[149] **Glaude P.A., Warth V., Fournet R., Battin-leclerc F., Scacchi G., Côme G.M.** (1998) : *Modeling of the oxidation of n-octane and n-decane using an automatic generation of mechanisms,* International Journal of Chemical Kinetics, vol. 30, pp. 949-959.

[150] **Zeppieri S.P., Klotz S.D., Dryer F.L.** (2000) : *Modeling concept for larger carbon number alkanes: a partialy reduced skeletal mechanism for n-decane oxidation and pyrolisis,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 28, pp. 1587-1595.

[151] **Lindstedt R.P., Maurice L.Q.** (2000) : *Detailed chemical-kinetic model for aviation fuels,* Journal of Propulsion and Power, vol. 16, pp. 187-195.

[152] **Battin-leclerc F., Fournet R., Glaude P.A., Judenherc B., Warth V., Côme G.M., Scacchi G.** (2000) : *Modeling of the gas phase oxidation of n-decane from 550 to 1600K,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 28, pp. 1597-1605.

[153] **Bikas G., Peters N.** (200) : *Kinetic modeling of n-decane combustion and autoignition,* Combustion and Flame, vol. 126, pp. 1456-1475.

[154] **Zhao Z., Li J., Kazakov A., Dryer F.L., Zeppieri S.P.** (2005) : *Burning velocities and a high-temperature skeletal kinetic model for n-decane,* Combustion Science and Technology, vol. 177, pp. 89-106.

[155] **Ranzi E., Frassoldati A., Granata S., Faravelli T.** (2005) : *Wide-range kinetic modeling study of the pyrolysis, partial oxidation and combustion of heavy n-alkanes,* Industrial and Engineering Chemistry Research, vol. 44, pp. 5170-5183.

[156] **Buda F., Bounaceur R., Warth V., Glaude P.A., Fournet R., Battin-leclerc F.** (2005) : *Progress toward a unifed detailled kinetic model for the autoignition of alkanes from C4 to C10 between 600 and 1200 K,* Combustion and Flame, vol. 142, pp. 170-186.

[157] **Olchanski E., Burcat A.** (2006) : *Decane oxidation in a shock tube,* International Journal of Chemical Kinetics, vol. 38, pp. 703-713.

[158] **Moréac G., Blurock E.S., Maus F.** (2006) : *Automatic generation of a detailed mechanism for the oxidation of n-decane,* Combustion Science and Technology, vol. 178, pp. 2025-2038.

[159] **Diévart P.** (2008) : *Oxydation et combustion en milieu ultra pauvre de carburants types gazoles - étude expérimentale en réacteur agité et modélisation,* Thèse, Université de Lille 1.

[160] **Biet J., Hakka M.H., Warth V., Glaude P.A., Battin-leclerc F.** (2008) : *Experimental and modeling study of the low-temperature oxidation of large alkanes,* Energy & Fuels, vol. 22, pp. 2258-2269.

[161] **Westbrook C.K., Pitz W.J., Herbinet O., Curran H.J., Silke E.J.** (2009) : *A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane,* Combustion and Flame, vol. 156, pp. 181-199.

[162] **Balès-Guéret C., Cathonnet M., Boettner J.C., Gaillard F.** (1992) : *Experimental study and kinetic modeling of higher hydrocarbons oxidation in a jet-stirred flow reactor,* Energy & Fuels, vol. 6, pp. 189-194.

[163] **Pfahl U., Fieweger A., Adomeit G.** (1996) : *Self-ignition of diesel relevant hydrocarbon/air mixtures under engine condition,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 26, pp. 781-789.

[164] **Davidson D.F., Herbon J.T., Horning D.C., Hanson R.K.** (2001) : *OH concentration time histories in n-alkane oxidation,* International Journal of Chemical Kinetics, vol. 33, pp. 775-783.

[165] **Zhukov V.P., Sechenov V.A., Starikovskii A.Y.** (2008) : *Autoignition of n-decane at high pressure,* Combustion and Flame, vol. 153, pp. 130-136.

[166] **Shen H.-P.S., Steinberg J., Vanderover J., Oehlschlaeger M.A.** (2009) : *A shock tube study of the ignition of n-heptane, n-decane, n-dodecane, and n-tetradecane at elevated pressures,* Energy & Fuels, vol. 23, pp. 2482-2489.

[167] **Horning D.C., Davidson D.F., Hanson R.K.** (2002) : *Study of the high temperature auto-ignition of n-alkane/O2/Ar mixtures,* Journal of Propulsion and Power, vol. 18.

[168] **Kumar K., Mittal G., Sung C.-J.** (2009) : *Autoignition of n-decane under elevated pressure and low-to-intermediate temperature conditions,* Combustion and Flame, vol. 156, pp. 1278-1288.

[169] **Westbrook C.K., Warnatz J., Pitz W.J.** (1988) : *A detailled chemical kinetic reaction mechanism for the oxidation of iso-octane and n-heptane over an extended temperature range and its application to analysis of engine knock,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 22, pp. 893-901.

[170] **Chen J.S., Litzinger T.A., Curran H.J.** (2000) : *The lean oxidation of iso-octane in the intermediate temperature regime at elevated pressure,* Combustion Science and Technology, vol. 56, pp. 49-79.

[171] **Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., Westbrook C.K.** (2002) : *A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation,* Combustion and Flame, vol. 129, pp. 253-280.

[172] **Mehl M., Pitz W.J., Sjöberg M., Dec J.E.** (2009) : *Detailed kinetic modeling of low temperature heat release for PRF fuels in an HCCI engine,* SAE Paper, 2009-01-1806.

[173] **Axelson E.I., Brezinsky K., Dryer F.L., Pitz W.J., Westbrook C.K.** (1986) : *Chemical kinetic modeling of the oxidation of large alkane fuels: n-octane and iso-octane,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 16, pp. 783-793.

[174] **Côme G.M., Warth V., Glaude P.A., Fournet R., Battin-leclerc F., Scacchi G.** (1996) : *Computer-aide design for gas phase oxidation mechanisms - application to the modelling of n-heptane and iso-octane oxidation,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 26, pp. 755-762.

[175] **Ranzi E., Faravelli T., Gaffuri P., Sogaro A., D'Anna A., Ciajolo A.** (1997) : *A wide range modeling study of iso-octane oxidation,* Combustion and Flame, vol. 108, pp. 24-42.

[176] **Glaude P.A., Conraud V., Fournet R., Battin-leclerc F., Côme G.M., Scacchi G., Dagaut P., Cathonnet M.** (2002) : *Modeling the oxidation of mixtures of primary reference automobile fuels,* Energy & Fuels, vol. 16, pp. 1186-1195.

[177] **Andelohr J.M., Bounaceur R., Pires da Cruz A., Battin-leclerc F.** (2009) : *Modeling of autoignition and NO sensitization for the oxidation of IC engine surrogate fuels,* Combustion and Flame, vol. 156, pp. 505-521.

[178] **Vermeer D.J., Meyer J.W., Oppenheim A.K.** (1972) : *Auto-ignition of hydrocarbons behind reflected shock waves,* Combustion and Flame, vol. 18, pp. 327-336.

[179] **Fieweger K., Blumenthal R., Adomeit R.** (1997) : *Self ignition of S.I. engine fuels: a shock tube investigation at high pressure,* Combustion and Flame, vol. 109, pp. 599-619.

[180] **Davidson D.F., Oehlschlaeger M.A., Herbon J.T., Hanson R.K.** (2002) : *Shock tube measurements of iso-octane ignition times and OH concentration time history,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 29, pp. 1295-1301.

[181] **Vanhove G., Petit G., Minetti R.** (2006) : *Experimental study of the kinetic interactions in the low-temperature autoignition of hydrocarbon binary mixtures and a surrogate fuel,* Combustion and Flame, vol. 145, pp. 521-532.

[182] **Dagaut P., Reuillon M., Cathonnet M.** (1994) : *High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature.2.mixtures of n-heptane and iso-octane,* Combustion Science and Technology, vol. 103, pp. 315-336.

[183] **Dagaut P., Daly C., Simmie J.M., Cathonnet M.** (1998) : *The oxidation and ignition of dimethylether from low to high temperature (500-1600 K): experiments and kinetic modeling,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 27, pp. 361-369.

[184] **Glaude P.A., Pitz W.J., Thomson M.J.** (2005) : *Chemical kinetic modeling of dimethyl carbonate in an opposed-flow diffusion flame,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 30, pp. 1111-1118.

[185] **Sato K., Hidaka Y.** (2000) : *Shock-tube and modeling study of acetone pyrolysis and oxidation,* Combustion and Flame, vol. 122, pp. 291-311.

[186] **Rotavera B., Petersen E.L.** (2012) : *Ignition behavior of pure and blended methyl octanoate, n-nonane, and methylcyclohexane,* Proceedings of the Combustion Institute.

[187] **Dayma G., Sarathy S.M., Togbé C., Yeoung C., Thomson M.J., Dagaut P.** (2011) : *Experimental and kinetic modeling of methyl octanoate oxidation in an opposed-flow diffusion flame and a jet-stirred reactor,* Proceedings of the Combustion Institute, vol. 33, pp. 1037-1043.

[188] **Natarajan K., Bhaskaran K.A.** (1981) : *An experimental and analytical investigation of high temperature ignition of ethanol,* International Symposium on Shock Tubes and Waves, vol. 13, pp. 834-842.

[189] **Dunphy M.P., Patterson P.M., Simmie J.M.** (1991) : *High temperature oxidation of ethanol part II : kinetic modelling,* Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions, vol. 87, pp. 2549-2559.

[190] **Dunphy M.P., Simmie J.M.** (1991) : *High temperature oxidation of ethanol part I : ignition delays in shock waves,* Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions, vol. 87, pp. 1691-1696.

[191] **Norton T.S., Dryer F.L.** (1992) : *An experimental and modeling study of ethanol oxidation kinetics in an atmospheric pressure flow reactor,* International Journal of Chemical Kinetics, vol. 24, pp. 319-344.

[192] **Dagaut P., Boettner J.C., Cathonnet M.** (1992) : *Kinetic modeling of ethanol pyrolysis,* Journal de Chimie Physique, vol. 89, pp. 867-884.

[193] **Li J., Kazakov A., Chaos M., Dryer F.L.** (2007) : *Chemical kinetics of ethanol oxidation,* 5th US Combustion Meeting, pp. 1-16.

[194] **Cancino L.R., Fikri M., Olivera A.A.M., Schulz C.** (2010) : *Measurement and chemical kinetics modeling of shock-induced ignition of ethanol-air mixtures,* Energy & Fuels, vol. 24, pp. 2830-2840.

[195] **Leplat N., Dagaut P., Togbé C., Vandooren J.** (2011) : *Numerical and experimental study of ethanol oxidation in laminar premixed flames and in jet-stirred reactor,* Combustion and Flame, vol. 158, pp. 725.

[196] **Fournet R., Glaude P.A., Bounaceur R., Molière M.** (2009) : *Theoretical kinetic study of the low temperature oxidation of ethanol,* Proceedings of the European combustion meeting.

[197] **Cancino L.R., Fikri M., Olivera A.A.M., Schulz C.** (2011) : *Ignition delay times of ethanol containing multi-component gasoline surrogates: schock tube experiments and detailed modeling,* Fuel, vol. 90, pp. 1238-1244.

[198] **Dagaut P., Cathonnet M., Rouan J.P., Foulatier R., Quilgars A., Boettner J.C., Gaillard F., James H.** (1986) : *A jet stirred reactor for kinetic studies of homogeneous gas-phase reactions at pressures up to 10 atmospheres,* Journal of Physics E: Scientific Instruments, vol. 19, pp. 207-209.

[199] **Tranchant J.** (1982) : *Manuel pratique de chromatographie en phase gazeuse,* édité par Masson.

[200] **Dagaut P., Reuillon M., Cathonnet M.** (1995) : *Experimental study of the oxidation of n-heptane in a jet-stirred reactor from low to high temperature and pressures up to 40 atm,* Combustion and Flame, vol. 101, pp. 132-140.

[201] **Alzueta M.U., Hernandez J.M.** (2002) : *Ethanol oxidation and its interaction with nitric oxide,* Energy & Fuels, vol. 16, pp. 166-171.

[202] **May-Carle J.B., Pidol L., Nicolle A., Anderlohr J.M., Togbé C., Dagaut P.** (2012) : *Experimental and numerical study of F-T/biodiesel/bioethanol surrogate fuel oxidation in jet-stirred reactor,* Combustion Science and Technology, vol. 184, pp. 901-915.

[203] **Alseda D.** (2007) : *Contrôle de la combustion en mode HCCI par une formulation adaptée du carburant,* Thèse, Université d'Orléans.

[204] **Delfort B., Durand A., Jaecker-Voirol A., Lacôme T., Paillé F., Montagne X.** (2002) : *Oxyganated compounds and Diesel engine pollutant emissions. Performance of new generation of products,* SAE Paper, 02-FFL-300.

[205] **Pidol L., Lecointe B., Starck L., Jeuland N.** (2012) : *Ethanol-biodiesel-diesel fuel blends: performances and emissions in conventional Diesel and advanced low temperature combustion,* Fuel, vol. 93, pp. 329-338.

[206] **Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A.**, (1991) : *Chemkin-II: A chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics*. Sandia Report: SAND87-8248.

[207] **Glarborg P., Kee R.J., Grcar J.F., Miller J.A.**.(1996) : *PSR - a Fortran program for modeling well-stirred reactors*. Sandia Report: SAND86-8209.

# Annexes

# Annexe 1 : Publications et communications issues de ce travail de thèse

## Publications

1. Chemical Kinetic Study of the Oxidation of a Biodiesel-Bioethanol Surrogate Fuel: Methyl Octanoate-Ethanol Mixtures. C. Togbé, J.-B. May-Carle, G. Dayma and P. Dagaut, *Journal of Physical Chemistry A*, 114, pp. 3896-3908, **2010**.

2. Experimental and Numerical Study of F-T/Biodiesel/Bioethanol Surrogate Fuel Oxidation in Jet-Stirred Reactor. J.-B. May-Carle, L. Pidol, A. Nicolle, J.M. Anderlohr, C. Togbé and P. Dagaut, *Combustion Science and Technology*, 184, pp. 901-915, **2012**.

## Conférence

Experimental and numerical study of F-T/biodiesel/ethanol oxidation in jet-stirred reactor. J.-B. May-Carle, L. Pidol, A. Nicolle, J.M. Anderlohr, C. Togbé et P. Dagaut. Présentation orale au 7$^{em}$ Symposium Méditerranéen de Combustion à Cagliari (Italie), le 12 septembre 2011.

## Poster

Ethanol and CI engines: combustion mechanisms and pollutants formation. J.-B. May-Carle, L. Pidol, A. Nicolle, J.M. Anderlohr, N. Jeuland, A. Jaecker-Voirol et P. Dagaut. Poster présenté au 10em symposium du CONCAWE à Brussel (Belgique), le 25 Mars 2013.

# Annexe 2 : Présentation des outils de calcul

L'outil numérique utilisé au cours de ce stage est le package Chemkin. Il s'agit d'un ensemble de programmes informatiques développés par les laboratoires Sandia dans les années 1980 afin d'analyser et de prédire la cinétique de systèmes réactifs complexes [206]. Il est composé de quatre éléments principaux :

## Mécanisme réactionnel

Le mécanisme réactionnel (chem.inp) est un ensemble de réactions élémentaires décrivant les étapes de transformation des réactifs en produits lors du processus étudié. La constante de vitesse de chaque réaction est exprimée sous la forme d'une équation d'Arrhenius modifiée:

$$k = A \times T^{n} \times \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \qquad \textit{(E A-1)}$$

Avec A facteur pré-exponentiel

n coefficient régissant la variation du facteur pré-exponentiel avec la température

$E_a$ énergie d'activation (cal.mol$^{-1}$)

## Base de données thermodynamiques

Les données thermodynamiques de chaque espèce intervenant dans le mécanisme doivent être présentes dans un fichier annexe (therm.dat). Cette base de données contient des coefficients polynomiaux permettant l'évaluation des capacités calorifiques à pression constante ($C_p$), des enthalpies (H°) et des entropies standards (S°). Pour chaque espèce, deux polynômes sont disponibles pour évaluer ces grandeurs, l'un pour le domaine de basse température (de 300 K à 1000 K) et l'autre pour le domaine de haute température (1000 K à 5000 K). Il y a 7 coefficients ($a_1$,...,$a_7$) pour chaque domaine de température, soit au total 14 par espèce. La capacité calorifique à pression constante $C_p^0$ est calculée de cette façon:

$$\frac{C_p^0}{R} = \sum_{n=1}^{N} a_n T^{(n-1)} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \qquad \textit{(E A-2)}$$

L'enthalpie standard est donnée par la relation A-3 :

$$\frac{H^0}{RT} = \frac{1}{RT}\int_0^T C_p^0 . dT = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T} \qquad \textit{(E A-3)}$$

Enfin, l'entropie standard s'obtient suivant l'équation A-4 :

$$\frac{S^0}{R} = \frac{1}{R}\int_0^T \frac{C_p^0}{T} . dT = a_1 \ln(T) + a_2 T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7 \qquad \textit{(E A-4)}$$

## Interpréteur chimique

L'interpréteur chimique (ckinterp.f) convertit le mécanisme réactionnel (chem.inp) en un équivalent numérique et fait le lien avec les données thermodynamiques de chaque espèce (therm.dat) afin de générer un fichier lien binaire (chem.bin). Ce fichier sera utilisé ultérieurement par les diverses sous-routines de Chemkin. L'interpréteur chimique génère également un fichier de sortie (chem.out) résumant l'ensemble des informations contenues dans le fichier binaire.

## Librairie de sous-programme

La librairie de sous-programmes est un ensemble d'applications en langage fortran permettant de calculer les températures et les fractions massiques de chaque espèce pour une condition d'entrée donnée. Au cours de cette, l'application principalement utilisée pour simuler les différentes expériences effectuées est PSR (Perfectly Stirred Reactor). Ce programme, créé en 1986 par Glarborg et al. [207], permet de prédire la température et la composition à l'intérieur d'un réacteur parfaitement agité (cf. figure A-1). Ce type de réacteur se présente schématiquement sous la forme d'une chambre dans laquelle une température et une composition constante sont assurées par un brassage intense.

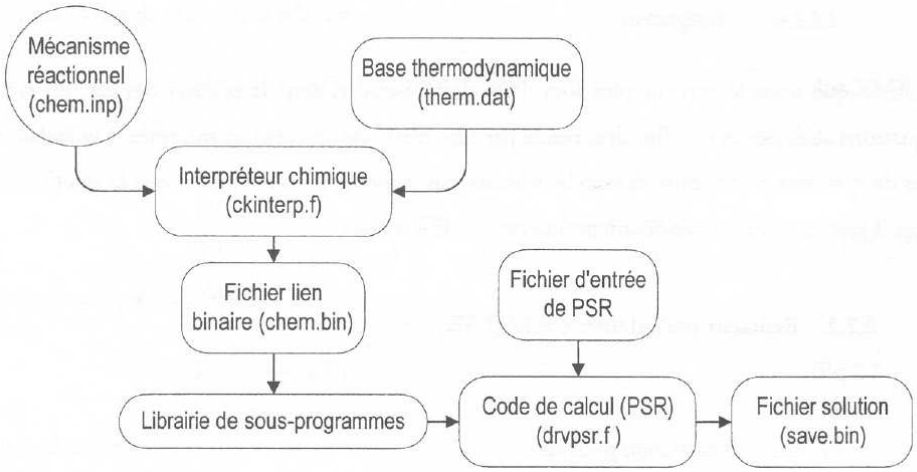



Figure A-1 : Fonctionnement de PSR au sein de Chemkin II

# Annexe 3 : Nomenclature du mécanisme cinétique

## N-alcanes :

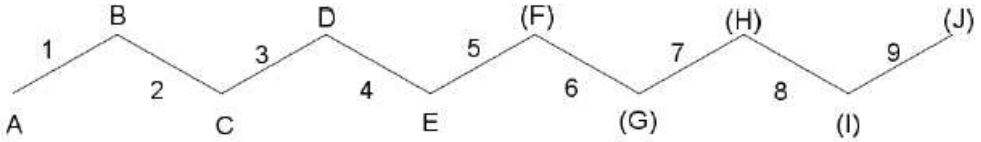



Figure A-2 : Nomenclature utilisée dans le sous-mécanisme d'oxydation du n-décane [159]

Dans cette étude, la nomenclature utilisée dans le sous-mécanisme d'oxydation des n-alcanes découle de celle utilisée par Pascal Diévart [159]. La méthodologie utilisée ici consiste à attribuer à chaque atome de la molécule une lettre en majuscule et un chiffre à chaque liaison carbone-carbone. L'exemple dans le cas du n-décane est représenté ci-dessus. Ensuite, chaque fonction a été représenté par une lettre ou un groupe de lettres minuscules, par analogie avec le modèle de Curran []. Des exemples d'application de cette nomenclature sont donnés dans le tableau ci-dessous.

Tableau A-1 : Exemples de nomenclature des intermédiaires d'oxydation des n-alcanes [159]

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

## Esters méthyliques :

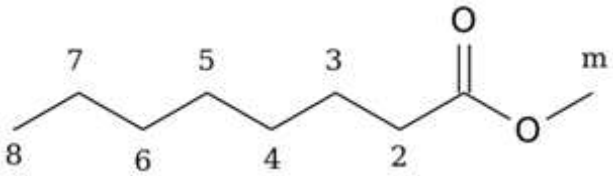
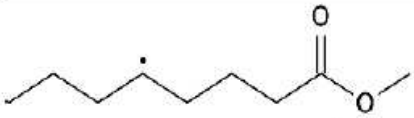
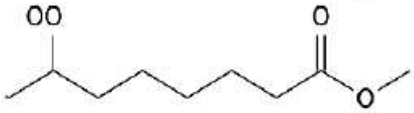
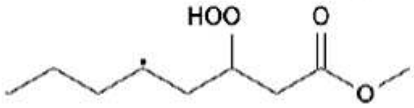
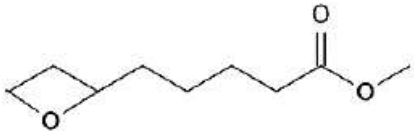
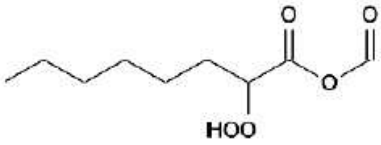



Figure A-3 : Nomenclature utilisée dans le sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle

La nomenclature utilisée dans le sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle découle quant à elle de celle adoptée par Fischer et al. [109]. Cette méthodologie consiste à attribuer à chaque atome de la molécule un chiffre en commençant par le carbone de la fonction carbonyle (cf. Figure A-3). La position des différentes fonctions sont désignées par le numéro du carbone et un groupe de lettres minuscules (cf. Tableau A-2).

Tableau A-2 : Exemples de nomenclature des intermédiaires d'oxydation des esters méthyliques

| Name | Species |
|---|---|
| mo5j |  |
| mo3d | |
| mo7oo |  |
| mo3ooh5j |  |
| mocy8o6 |  |
| mo2oohm*o |  |

**Jean-Baptiste MAY-CARLE**

## Ethanol et moteur Diesel : mécanismes de combustion et formation des polluants

**Résumé**

Les mélanges GtL/EMHC/éthanol ont un potentiel important comme carburant alternatif pour moteur Diesel. Néanmoins, l'utilisation de ce type de biocarburant en moteur Diesel nécessite une connaissance précise de la cinétique d'oxydation de ses différents constituants.

Une étude bibliographique approfondie a permis de sélectionner quatre espèces modèles représentatives des mélanges GtL/EMHC/éthanol : le n-décane, l'iso-octane, l'octanoate de méthyle et l'éthanol. L'oxydation de mélanges de ces espèces modèles a ensuite été étudiée en réacteur auto-agité à haute pression (10 atm), pour trois richesses (0,5 ; 1 et 2) et sur un large domaine de température (550-1150 K). L'analyse des échantillons par chromatographie en phase gazeuse a permis de quantifier les principaux produits issus de l'oxydation des mélanges étudiés. Un mécanisme cinétique détaillé capable de reproduire l'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol a ensuite été mis au point. Les prédictions du modèle reproduisent de manière satisfaisante les résultats expérimentaux sur toute la gamme de richesse et de température testée en réacteur auto-agité. L'analyse du modèle a également permis de déterminer les voies réactionnelles prépondérantes en fonction de la composition des mélanges.

Enfin, la combustion de mélanges GtL/EMAG/éthanol a été étudiée en moteur monocylindre Diesel. Cette phase d'essais, incluant une analyse approfondie des émissions non réglementées, a permis d'observer l'influence de la formulation des carburants sur l'initiation de la combustion et sur la composition des gaz d'échappements.

**Mots clés** : Biocarburants, combustion, polluants, modélisation cinétique, réacteur auto-agité, banc moteur

## Ethanol and CI engines: combustion mechanisms and pollutants formation

**Abstract:**

As concern about global warming and dependences on fossil fuel grows, there is an increasing interest to shift from traditional fuel to renewable energy sources. Blends of Fischer-Tropsch (F-T) fuels, biodiesel and ethanol seem to be a promising fuel for compression ignition (CI) engine application. The aim of this work is to study and model the impact of these fuels on combustion and pollutant emissions.

In the present study, mixtures of 4 species are proposed to represent the oxidation of F-T/biodiesel/ethanol blends: n-decane, iso-octane, methyl octanoate and ethanol. The kinetic of oxidation of n-decane/iso-octane/methyl octanoate/ethanol blends was studied experimentally in a jet stirred reactor at 10 atm and a constant residence time of 1 s, over the temperature range of 560-1160 K and for three equivalence ratio (0.5, 1 and 2). A kinetic reaction mechanism was developed and used to simulate the oxidation of n-decane/iso-octane/methyl octanoate/ethanol mixtures. The proposed kinetic reaction mechanism yields a good representation of the kinetic of oxidation of the tested biofuel blends. The kinetic analyses allowed identifying the most influencing reactions for the oxidation rate of the fuels.

Finally, four F-T/biodiesel/ethanol blends have been tested on a single cylinder, direct injection, four-stroke Diesel engine. This study, including an analysis of unregulated emissions allowed observing the influence of fuel formulation on combustion and on pollutant emissions. These main engine results tendencies have been compared to the results of the kinetic model.

Key words: biofuels, combustion, pollutants, kinetic modelling, jet stirred reactor, engine bench

**ICARE – CNRS – UPR 3021**
**1c avenue de la recherche scientifique**
**45071 Orléans cedex 2**

(k = A T**b exp(-E/RT))

| REACTIONS CONSIDERED | A | b | E |
|---|---|---|---|
| 1. nc10h22=Ac5h11+Ac5h11 | 2.00E+17 | 0.0 | 83180.0 |
| 2. nc10h22=pc4h9+Ac6h13 | 2.00E+17 | 0.0 | 83180.0 |
| 3. nc10h22=nc3h7+Ac7h15 | 2.00E+17 | 0.0 | 83400.0 |
| 4. nc10h22=c2h5+Ac8h17 | 2.00E+17 | 0.0 | 83680.0 |
| 5. nc10h22=ch3+Ac9h19 | 2.00E+17 | 0.0 | 85570.0 |
| 6. nc10h22=h+Ac10h21 | 1.00E+15 | 0.0 | 100000.0 |
| 7. nc10h22=h+Bc10h21 | 1.00E+15 | 0.0 | 100000.0 |
| 8. nc10h22=h+Cc10h21 | 1.00E+15 | 0.0 | 100000.0 |
| 9. nc10h22=h+Dc10h21 | 1.00E+15 | 0.0 | 100000.0 |
| 10. nc10h22=h+Ec10h21 | 1.00E+15 | 0.0 | 100000.0 |
| 11. nc10h22+o2=ho2+Ac10h21 | 4.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 12. nc10h22+o2=ho2+Bc10h21 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 13. nc10h22+o2=ho2+Cc10h21 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 14. nc10h22+o2=ho2+Dc10h21 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 15. nc10h22+o2=ho2+Ec10h21 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 16. nc10h22+oh=h2o+Ac10h21 | 1.41E+07 | 1.8 | 973.7 |
| 17. nc10h22+oh=h2o+Bc10h21 | 1.99E+06 | 2.0 | -596.2 |
| 18. nc10h22+oh=h2o+Cc10h21 | 2.25E+06 | 2.0 | -1391.0 |
| 19. nc10h22+oh=h2o+Dc10h21 | 2.25E+06 | 2.0 | -1391.0 |
| 20. nc10h22+oh=h2o+Ec10h21 | 2.25E+06 | 2.0 | -1391.0 |
| 21. nc10h22+ho2=h2o2+Ac10h21 | 3.60E+04 | 2.5 | 16683.0 |
| 22. nc10h22+ho2=h2o2+Bc10h21 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 23. nc10h22+ho2=h2o2+Cc10h21 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 24. nc10h22+ho2=h2o2+Dc10h21 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 25. nc10h22+ho2=h2o2+Ec10h21 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 26. nc10h22+h=h2+Ac10h21 | 5.70E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 27. nc10h22+h=h2+Bc10h21 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 28. nc10h22+h=h2+Cc10h21 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 29. nc10h22+h=h2+Dc10h21 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 30. nc10h22+h=h2+Ec10h21 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 31. o+nc10h22=oh+Ac10h21 | 1.00E+14 | 0.0 | 7850.0 |
| 32. o+nc10h22=oh+Bc10h21 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 33. o+nc10h22=oh+Cc10h21 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 34. o+nc10h22=oh+Dc10h21 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 35. o+nc10h22=oh+Ec10h21 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 36. nc10h22+ch3=ch4+Ac10h21 | 6.00E-01 | 4.0 | 8200.0 |
| 37. nc10h22+ch3=ch4+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 38. nc10h22+ch3=ch4+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 39. nc10h22+ch3=ch4+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 40. nc10h22+ch3=ch4+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 41. nc10h22+c2h5=c2h6+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13500.0 |
| 42. nc10h22+c2h5=c2h6+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 43. nc10h22+c2h5=c2h6+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 44. nc10h22+c2h5=c2h6+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 45. nc10h22+c2h5=c2h6+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 46. nc10h22+hco=ch2o+Ac10h21 | 2.00E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 47. nc10h22+hco=ch2o+Bc10h21 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 48. nc10h22+hco=ch2o+Cc10h21 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 49. nc10h22+hco=ch2o+Dc10h21 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 50. nc10h22+hco=ch2o+Ec10h21 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 51. nc10h22+ch3o=ch3oh+Ac10h21 | 3.20E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 52. nc10h22+ch3o=ch3oh+Bc10h21 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 53. nc10h22+ch3o=ch3oh+Cc10h21 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 54. nc10h22+ch3o=ch3oh+Dc10h21 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 55. nc10h22+ch3o=ch3oh+Ec10h21 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 56. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ac10h21 | 2.00E+02 | 3.0 | 14000.0 |
| 57. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Bc10h21 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |
| 58. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Cc10h21 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |
| 59. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Dc10h21 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |
| 60. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ec10h21 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |
| 61. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ac10h21 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 62. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Bc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 63. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Cc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 64. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Dc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 65. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ec10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 66. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 67. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 68. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 69. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 70. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 71. nc10h22+ch3co=ch3hco+Ac10h21 | 3.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 72. nc10h22+ch3co=ch3hco+Bc10h21 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 73. nc10h22+ch3co=ch3hco+Cc10h21 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 74. nc10h22+ch3co=ch3hco+Dc10h21 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 75. nc10h22+ch3co=ch3hco+Ec10h21 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 76. nc10h22+nc3h7=c3h8+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 77. nc10h22+nc3h7=c3h8+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 78. nc10h22+nc3h7=c3h8+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 79. nc10h22+nc3h7=c3h8+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 80. nc10h22+nc3h7=c3h8+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 81. nc10h22+pc4h9=c4h10+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 82. nc10h22+pc4h9=c4h10+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 83. nc10h22+pc4h9=c4h10+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 84. nc10h22+pc4h9=c4h10+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 85. nc10h22+pc4h9=c4h10+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 86. nc10h22+Ac5h11=c5h12+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 87. nc10h22+Ac5h11=c5h12+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 88. nc10h22+Ac5h11=c5h12+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 89. nc10h22+Ac5h11=c5h12+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 90. nc10h22+Ac5h11=c5h12+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 91. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 92. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 93. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 94. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 95. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 96. nc10h22+Ac7h15=c7h16+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 97. nc10h22+Ac7h15=c7h16+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 98. nc10h22+Ac7h15=c7h16+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 99. nc10h22+Ac7h15=c7h16+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 100. nc10h22+Ac7h15=c7h16+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 101. nc10h22+Ac8h17=c8h18+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 102. nc10h22+Ac8h17=c8h18+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 103. nc10h22+Ac8h17=c8h18+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 104. nc10h22+Ac8h17=c8h18+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 105. nc10h22+Ac8h17=c8h18+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 106. nc10h22+Ac9h19=c9h20+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 107. nc10h22+Ac9h19=c9h20+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 108. nc10h22+Ac9h19=c9h20+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 109. nc10h22+Ac9h19=c9h20+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 110. nc10h22+Ac9h19=c9h20+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 111. nc10h22+Bc9h19=c9h20+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 112. nc10h22+Bc9h19=c9h20+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 113. nc10h22+Bc9h19=c9h20+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 114. nc10h22+Bc9h19=c9h20+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 115. nc10h22+Bc9h19=c9h20+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 116. nc10h22+Cc9h19=c9h20+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 117. nc10h22+Cc9h19=c9h20+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 118. nc10h22+Cc9h19=c9h20+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 119. nc10h22+Cc9h19=c9h20+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 120. nc10h22+Cc9h19=c9h20+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 121. nc10h22+Dc9h19=c9h20+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 122. nc10h22+Dc9h19=c9h20+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 123. nc10h22+Dc9h19=c9h20+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 124. nc10h22+Dc9h19=c9h20+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 125. nc10h22+Dc9h19=c9h20+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 126. nc10h22+Ec9h19=c9h20+Ac10h21 | 6.00E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 127. nc10h22+Ec9h19=c9h20+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 128. nc10h22+Ec9h19=c9h20+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 129. nc10h22+Ec9h19=c9h20+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 130. nc10h22+Ec9h19=c9h20+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 131. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Bc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 132. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 133. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 134. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 135. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Cc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 136. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 137. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 138. nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Dc10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 139. nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 140. nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ec10h21 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 141. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ac10h21 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 142. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Bc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 143. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Cc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 144. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Dc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 145. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ec10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 146. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ac10h21 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 147. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Bc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 148. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Cc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 149. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Dc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 150. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ec10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 151. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ac10h21 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 152. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Bc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 153. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Cc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 154. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Dc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 155. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ec10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 156. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ac10h21 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 157. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Bc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 158. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Cc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 159. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Dc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 160. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ec10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 161. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ac10h21 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 162. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Bc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 163. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Cc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 164. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Dc10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 165. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ec10h21 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 166. Ac10h21=Ac8h17+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 167. Bc10h21=Ac7h15+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 168. Cc10h21=Ac6h13+c4h8 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 169. Cc10h21=ch3+c9h18 | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 170. Dc10h21=Ac5h11+c5h10 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 171. Dc10h21=c2h5+c8h16 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 172. Ec10h21=pc4h9+c6h12-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 173. Ec10h21=nc3h7+c7h14-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 174. Ac10h21=h+c10h20-1 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 175. Bc10h21=h+c10h20-1 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 176. Bc10h21=h+c10h20-2 | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| 177. Cc10h21=h+c10h20-2 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 178. Cc10h21=h+c10h20-3 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 179. Dc10h21=h+c10h20-3 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 180. Dc10h21=h+c10h20-4 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 181. Ec10h21=h+c10h20-4 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 182. Ec10h21=h+c10h20-5 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 183. Ac10h21+o2=c10h20-1+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 184. Bc10h21+o2=c10h20-1+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 185. Bc10h21+o2=c10h20-2+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 186. Cc10h21+o2=c10h20-2+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 187. Cc10h21+o2=c10h20-3+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 188. Dc10h21+o2=c10h20-3+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 189. Dc10h21+o2=c10h20-4+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 190. Ec10h21+o2=c10h20-4+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 191. Ec10h21+o2=c10h20-5+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 192. Ac10h21+o=ch2o+Ac9h19 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 193. Bc10h21+o=ch3hco+Ac8h17 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 194. Bc10h21+o=ch3+c8h17hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 195. Cc10h21+o=c2h5hco+Ac7h15 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 196. Cc10h21+o=c2h5+c7h15hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 197. Dc10h21+o=nc3h7+c6h13hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 198. Dc10h21+o=nc3h7hco+Ac6h13 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 199. Ec10h21+o=pc4h9+c5h11hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 200. Ec10h21+o=nc4h9hco+Ac5h11 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 201. Ac10h21+oh=ch2o+c9h20 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 202. Bc10h21+oh=ch3hco+c8h18 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 203. Bc10h21+oh=ch4+c8h17hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 204. Cc10h21+oh=c2h5hco+c7h16 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 205. Cc10h21+oh=c2h6+c7h15hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 206. Dc10h21+oh=c3h8+c6h13hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 207. Dc10h21+oh=nc3h7hco+c6h14 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 208. Ec10h21+oh=c4h10+c5h11hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 209. Ec10h21+oh=nc4h9hco+c5h12 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 210. Ac10h21+ho2=ch2o+Ac9h19+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 211. Bc10h21+ho2=ch3hco+Ac8h17+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 212. Bc10h21+ho2=ch3+c8h17hco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 213. Cc10h21+ho2=c2h5hco+Ac7h15+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 214. Cc10h21+ho2=c2h5+c7h15hco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 215. Dc10h21+ho2=nc3h7+c6h13hco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 216. Dc10h21+ho2=nc3h7hco+Ac6h13+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 217. Ec10h21+ho2=pc4h9+c5h11hco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 218. Ec10h21+ho2=nc4h9hco+Ac5h11+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 219. Ac10h21=Cc10h21 | 3.03E+09 | 1.0 | 38748.6 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.58E+09 | 1.0 | 38652.3 |
| 220. Ac10h21=Dc10h21 | 5.13E+08 | 1.0 | 19047.3 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.45E+08 | 1.0 | 18951.0 |
| 221. Ac10h21=Ec10h21 | 5.90E+07 | 1.1 | 13697.1 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.09E+08 | 1.0 | 13601.3 |
| 222. Bc10h21=Cc10h21 | 3.02E+06 | 1.0 | 22596.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.83E+06 | 1.0 | 22604.1 |
| 223. Bc10h21=Dc10h21 | 6.01E+03 | 2.1 | 17926.3 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.65E+03 | 2.1 | 17935.2 |
| 224. Bc10h21=Ec10h21 | 2.39E+04 | 2.2 | 12746.8 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.24E+04 | 2.2 | 12755.0 |
| 225. Cc10h21=Dc10h21 | 9.89E+07 | 1.0 | 13700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.89E+07 | 1.0 | 13700.0 |
| 226. Cc10h21=Ec10h21 | 4.07E+08 | 1.1 | 18948.1 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.07E+08 | 1.1 | 18948.1 |
| 227. Dc10h21=Ec10h21 | 3.35E+09 | 1.0 | 38700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.35E+09 | 1.0 | 38700.0 |
| 228. Ac10h21+o2=c10h21qjA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 229. Bc10h21+o2=c10h21qjB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 230. | Cc10h21+o2=c10h21qjC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 231. | Dc10h21+o2=c10h21qjD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 232. | Ec10h21+o2=c10h21qjE | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 233. | Ac10h21+ho2=c10h21ojA+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 234. | Bc10h21+ho2=c10h21ojB+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 235. | Cc10h21+ho2=c10h21ojC+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 236. | Dc10h21+ho2=c10h21ojD+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 237. | Ec10h21+ho2=c10h21ojE+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 238. | Ac10h21+ch3o2=c10h21ojA+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 239. | Bc10h21+ch3o2=c10h21ojB+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 240. | Cc10h21+ch3o2=c10h21ojC+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 241. | Dc10h21+ch3o2=c10h21ojD+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 242. | Ec10h21+ch3o2=c10h21ojE+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 243. | Ac10h21+c2h5o2=c10h21ojA+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 244. | Bc10h21+c2h5o2=c10h21ojB+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 245. | Cc10h21+c2h5o2=c10h21ojC+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 246. | Dc10h21+c2h5o2=c10h21ojD+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 247. | Ec10h21+c2h5o2=c10h21ojE+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 248. | Ac10h21+nc3h7o2=c10h21ojA+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 249. | Bc10h21+nc3h7o2=c10h21ojB+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 250. | Cc10h21+nc3h7o2=c10h21ojC+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 251. | Dc10h21+nc3h7o2=c10h21ojD+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 252. | Ec10h21+nc3h7o2=c10h21ojE+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 253. | Ac10h21+ic3h7o2=c10h21ojA+ic3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 254. | Bc10h21+ic3h7o2=c10h21ojB+ic3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 255. | Cc10h21+ic3h7o2=c10h21ojC+ic3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 256. | Dc10h21+ic3h7o2=c10h21ojD+ic3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 257. | Ec10h21+ic3h7o2=c10h21ojE+ic3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 258. | Ac10h21+c10h21qjA=2c10h21ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 259. | Bc10h21+c10h21qjA=c10h21ojB+c10h21ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 260. | Cc10h21+c10h21qjA=c10h21ojC+c10h21ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 261. | Dc10h21+c10h21qjA=c10h21ojD+c10h21ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 262. | Ec10h21+c10h21qjA=c10h21ojE+c10h21ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 263. | Ac10h21+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 264. | Bc10h21+c10h21qjB=2c10h21ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 265. | Cc10h21+c10h21qjB=c10h21ojC+c10h21ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 266. | Dc10h21+c10h21qjB=c10h21ojD+c10h21ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 267. | Ec10h21+c10h21qjB=c10h21ojE+c10h21ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 268. | Ac10h21+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 269. | Bc10h21+c10h21qjC=c10h21ojB+c10h21ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 270. | Cc10h21+c10h21qjC=2c10h21ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 271. | Dc10h21+c10h21qjC=c10h21ojD+c10h21ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 272. | Ec10h21+c10h21qjC=c10h21ojE+c10h21ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 273. | Ac10h21+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 274. | Bc10h21+c10h21qjD=c10h21ojB+c10h21ojD | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 275. | Cc10h21+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 276. | Dc10h21+c10h21qjD=2c10h21ojD | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 277. | Ec10h21+c10h21qjD=c10h21ojE+c10h21ojD | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 278. | Ac10h21+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 279. | Bc10h21+c10h21qjE=c10h21ojB+c10h21ojE | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 280. | Cc10h21+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 281. | Dc10h21+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 282. | Ec10h21+c10h21qjE=2c10h21ojE | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 283. | c10h21ojA=ch2o+Ac9h19 | 1.00E+15 | 0.0 | 21600.0 |
| 284. | c10h21ojB=ch3hco+Ac8h17 | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 285. | c10h21ojB=ch3+c8h17hco | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 286. | c10h21ojC=c2h5hco+Ac7h15 | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 287. | c10h21ojC=c2h5+c7h15hco | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 288. | c10h21ojD=nc3h7+c6h13hco | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 289. | c10h21ojD=nc3h7hco+Ac6h13 | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 290. | c10h21ojE=pc4h9+c5h11hco | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 291. | c10h21ojE=nc4h9hco+Ac5h11 | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 292. | c10h21qA=oh+c10h21ojA | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 293. | c10h21qB=oh+c10h21ojB | 1.25E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 294. | c10h21qC=oh+c10h21ojC | 1.25E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 295. | c10h21qD=oh+c10h21ojD | 1.25E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 296. | c10h21qE=oh+c10h21ojE | 1.25E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 297. | c10h21qjA=c10h20rBqA | 1.58E+08 | 1.4 | 32031.9 |
| 298. | c10h21qjA=c10h20rCqA | 2.72E+07 | 1.4 | 24531.9 |
| 299. | c10h21qjA=c10h20rDqA | 4.67E+06 | 1.4 | 21531.9 |
| 300. | c10h21qjA=c10h20rEqA | 8.03E+05 | 1.4 | 20531.9 |
| 301. | c10h21qjB=c10h20rAqB | 2.27E+11 | 0.5 | 33286.6 |
| 302. | c10h21qjB=c10h20rCqB | 7.20E+10 | 0.6 | 32656.8 |
| 303. | c10h21qjB=c10h20rDqB | 1.29E+10 | 0.6 | 25162.9 |
| 304. | c10h21qjB=c10h20rEqB | 2.26E+09 | 0.6 | 22166.5 |
| 305. | c10h21qjB=c10h20rFqB | 3.93E+08 | 0.6 | 21167.9 |
| 306. | c10h21qjC=c10h20rAqC | 7.26E+07 | 1.3 | 25390.4 |
| 307. | c10h21qjC=c10h20rBqC | 3.44E+08 | 1.3 | 31647.9 |
| 308. | c10h21qjC=c10h20rDqC | 2.20E+08 | 1.4 | 31579.7 |
| 309. | c10h21qjC=c10h20rEqC | 3.78E+07 | 1.4 | 24579.7 |
| 310. | c10h21qjC=c10h20rFqC | 6.73E+06 | 1.4 | 21584.7 |
| 311. | c10h21qjC=c10h20rGqC | 1.16E+06 | 1.4 | 20584.7 |
| 312. | c10h21qjD=c10h20rAqD | 1.25E+07 | 1.3 | 22390.4 |
| 313. | c10h21qjD=c10h20rBqD | 5.91E+07 | 1.3 | 24648.0 |
| 314. | c10h21qjD=c10h20rCqD | 2.28E+08 | 1.4 | 32084.6 |
| 315. | c10h21qjD=c10h20rEqD | 2.20E+08 | 1.4 | 32079.7 |
| 316. | c10h21qjD=c10h20rFqD | 3.92E+07 | 1.4 | 24584.6 |
| 317. | c10h21qjD=c10h20rGqD | 6.73E+06 | 1.4 | 22584.7 |
| 318. | c10h21qjD=c10h20rHqD | 1.16E+06 | 1.4 | 20584.7 |
| 319. | c10h21qjE=c10h20rAqE | 1.64E+18 | -2.3 | 26547.1 |
| 320. | c10h21qjE=c10h20rBqE | 3.45E+09 | 0.5 | 22432.8 |
| 321. | c10h21qjE=c10h20rCqE | 1.26E+10 | 0.6 | 25361.2 |
| 322. | c10h21qjE=c10h20rDqE | 7.04E+10 | 0.6 | 32855.1 |
| 323. | c10h21qjE=c10h20rFqE | 7.04E+10 | 0.6 | 32855.1 |
| 324. | c10h21qjE=c10h20rGqE | 1.26E+10 | 0.6 | 25361.2 |
| 325. | c10h21qjE=c10h20rHqE | 2.21E+09 | 0.6 | 22364.7 |
| 326. | c10h21qjE=c10h20rIqE | 5.99E+08 | 0.5 | 21434.2 |
| 327. | c10h21qjA+ho2=c10h21qA+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 328. | c10h21qjB+ho2=c10h21qB+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 329. | c10h21qjC+ho2=c10h21qC+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 330. | c10h21qjD+ho2=c10h21qD+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 331. | c10h21qjE+ho2=c10h21qE+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 332. | c10h21qjA+h2o2=c10h21qA+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 333. | c10h21qjB+h2o2=c10h21qB+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 334. | c10h21qjC+h2o2=c10h21qC+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 335. | c10h21qjD+h2o2=c10h21qD+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 336. | c10h21qjE+h2o2=c10h21qE+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 337. | c10h21qjA+ho2=>c10h21ojA+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 338. | c10h21qjB+ho2=>c10h21ojB+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 339. | c10h21qjC+ho2=>c10h21ojC+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 340. | c10h21qjD+ho2=>c10h21ojD+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 341. | c10h21qjE+ho2=>c10h21ojE+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 342. | c10h20rDqA=c8h16+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 343. | c10h20rEqA=c7h14-1+c3h6ooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 344. | c10h20rEqB=c7h14-1+c3h6ooh2-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 345. | c10h20rFqB=c6h12-1+c4h8rDqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 346. | c10h20rFqC=c6h12-1+c4h8rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 347. | c10h20rGqC=c5h10+c5h10rAqC | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 348. | c10h20rAqD=c2h4+c8h16rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 349. | c10h20rGqD=c5h10+c5h10rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 350. | c10h20rHqD=c4h8+c6h12rAqC | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 351. | c10h20rAqE=c2h4+c8h16rAqC | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 352. | c10h20rBqE=c3h6+c7h14rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 353. | c10h20rHqE=c4h8+c6h12rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 354. | c10h20rIqE=c3h6+c7h14rAqC | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 355. | c10h20rCqA+o2=c10h20qjCqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 356. | c10h20rBqA+o2=c10h20qjBqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 357. | c10h20rDqA+o2=c10h20qjDqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 358. | c10h20rEqA+o2=c10h20qjEqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 359. | c10h20rAqB+o2=c10h20qjAqB | 1.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 360. | c10h20rCqB+o2=c10h20qjCqB | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 361. | c10h20rDqB+o2=c10h20qjDqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 362. | c10h20rEqB+o2=c10h20qjEqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 363. | c10h20rFqB+o2=c10h20qjFqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 364. | c10h20rAqC+o2=c10h20qjAqC | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 365. | c10h20rBqC+o2=c10h20qjBqC | 9.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 366. | c10h20rDqC+o2=c10h20qjDqC | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 367. | c10h20rEqC+o2=c10h20qjEqC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 368. | c10h20rFqC+o2=c10h20qjFqC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 369. | c10h20rGqC+o2=c10h20qjGqC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 370. | c10h20rAqD+o2=c10h20qjAqD | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 371. | c10h20rBqD+o2=c10h20qjBqD | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 372. | c10h20rCqD+o2=c10h20qjCqD | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 373. | c10h20rEqD+o2=c10h20qjEqD | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 374. | c10h20rFqD+o2=c10h20qjFqD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 375. | c10h20rGqD+o2=c10h20qjGqD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 376. | c10h20rHqD+o2=c10h20qjHqD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 377. | c10h20rAqE+o2=c10h20qjAqE | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 378. | c10h20rBqE+o2=c10h20qjBqE | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 379. | c10h20rCqE+o2=c10h20qjCqE | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 380. | c10h20rDqE+o2=c10h20qjDqE | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 381. | c10h20rFqE+o2=c10h20qjFqE | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 382. | c10h20rGqE+o2=c10h20qjGqE | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 383. | c10h20rHqE+o2=c10h20qjHqE | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 384. | c10h20rIqE+o2=c10h20qjIqE | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 385. | c10h20rCqA=>oh+ch2o+c9h18 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 386. | c10h20rDqB=>oh+ch3hco+c8h16 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 387. | c10h20rAqC=>oh+c7h15hco+c2h4 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 388. | c10h20rEqC=>oh+c2h5hco+c7h14-1 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 389. | c10h20rBqD=>oh+c6h13hco+c3h6 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 390. | c10h20rFqD=>oh+nc3h7hco+c6h12-1 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 391. | c10h20rCqE=>oh+c5h11hco+c4h8 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 392. | c10h20rGqE=>oh+nc4h9hco+c5h10 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 393. | c10h20rBqA=oh+c10h20o-AB | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 394. | c10h20rCqA=oh+c10h20o-AC | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 395. | c10h20rDqA=oh+c10h20o-AD | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 396. | c10h20rEqA=oh+c10h20o-AE | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 397. | c10h20rAqB=oh+c10h20o-AB | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 398. | c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 399. | c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 400. | c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 401. | c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 402. | c10h20rAqC=oh+c10h20o-AC | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 403. | c10h20rBqC=oh+c10h20o-BC | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 404. | c10h20rDqC=oh+c10h20o-CD | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 405. | c10h20rEqC=oh+c10h20o-CE | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 406. | c10h20rFqC=oh+c10h20o-CF | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 407. | c10h20rGqC=oh+c10h20o-CG | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 408. | c10h20rAqD=oh+c10h20o-AD | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 409. | c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 410. | c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 411. | c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 412. | c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 413. | c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 414. | c10h20rHqD=oh+c10h20o-CG | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 415. | c10h20rAqE=oh+c10h20o-AE | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 416. | c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 417. | c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 418. | c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 419. | c10h20rFqE=oh+c10h20o-EF | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 420. | c10h20rGqE=oh+c10h20o-DF | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 421. | c10h20rHqE=oh+c10h20o-CF | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 422. | c10h20rIqE=oh+c10h20o-BF | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 423. | c10h20rAqB=ho2+c10h20-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 424. | c10h20rBqA=ho2+c10h20-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 425. | c10h20rBqC=ho2+c10h20-2 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 426. | c10h20rCqB=ho2+c10h20-2 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 427. | c10h20rCqD=ho2+c10h20-3 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 428. | c10h20rDqC=ho2+c10h20-3 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 429. | c10h20rDqE=ho2+c10h20-4 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 430. | c10h20rEqD=ho2+c10h20-4 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 431. | c10h20rFqE=ho2+c10h20-5 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 432. | c10h20qjBqA=>oh+c10h19oAqB | 6.10E+05 | 2.2 | 29924.4 |
| 433. | c10h20qjCqA=>oh+c10h19oAqC | 1.08E+05 | 2.2 | 22429.0 |
| 434. | c10h20qjDqA=>oh+c10h19oAqD | 1.89E+04 | 2.2 | 19431.7 |
| 435. | c10h20qjEqA=>oh+c10h19oAqE | 3.42E+03 | 2.2 | 18431.7 |
| 436. | c10h20qjAqB=>oh+c10h19oBqA | 1.56E+05 | 2.3 | 29112.2 |
| 437. | c10h20qjCqB=>oh+c10h19oBqC | 9.11E+08 | 1.1 | 30281.1 |
| 438. | c10h20qjDqB=>oh+c10h19oBqD | 1.56E+08 | 1.1 | 22783.0 |
| 439. | c10h20qjEqB=>oh+c10h19oBqE | 2.74E+07 | 1.1 | 19784.1 |
| 440. | c10h20qjFqB=>oh+c10h19oBqF | 4.73E+06 | 1.1 | 18784.6 |
| 441. | c10h20qjAqC=>oh+c10h19oCqA | 2.80E+04 | 2.3 | 21618.9 |
| 442. | c10h20qjBqC=>oh+c10h19oCqB | 5.80E+08 | 1.1 | 30212.7 |
| 443. | c10h20qjDqC=>oh+c10h19oCqD | 6.14E+08 | 1.1 | 30218.7 |
| 444. | c10h20qjEqC=>oh+c10h19oCqE | 9.64E+07 | 1.1 | 22707.8 |
| 445. | c10h20qjFqC=>oh+c10h19oCqF | 1.67E+07 | 1.1 | 19708.9 |
| 446. | c10h20qjGqC=>oh+c10h19oCqG | 2.88E+06 | 1.1 | 18709.3 |
| 447. | c10h20qjAqD=>oh+c10h19oDqA | 4.91E+03 | 2.3 | 18621.6 |
| 448. | c10h20qjBqD=>oh+c10h19oDqB | 1.01E+08 | 1.1 | 22714.5 |
| 449. | c10h20qjCqD=>oh+c10h19oDqC | 6.14E+08 | 1.1 | 30218.7 |
| 450. | c10h20qjEqD=>oh+c10h19oDqE | 6.14E+08 | 1.1 | 30218.7 |
| 451. | c10h20qjFqD=>oh+c10h19oDqF | 1.07E+08 | 1.1 | 22720.4 |
| 452. | c10h20qjGqD=>oh+c10h19oDqG | 1.85E+07 | 1.1 | 19721.4 |
| 453. | c10h20qjHqD=>oh+c10h19oDqH | 3.18E+06 | 1.1 | 18721.8 |
| 454. | c10h20qjAqE=>oh+c10h19oEqA | 8.49E+02 | 2.3 | 17622.7 |
| 455. | c10h20qjBqE=>oh+c10h19oEqB | 1.75E+07 | 1.1 | 19715.7 |
| 456. | c10h20qjCqE=>oh+c10h19oEqC | 1.07E+08 | 1.1 | 22720.4 |
| 457. | c10h20qjDqE=>oh+c10h19oEqD | 6.14E+08 | 1.1 | 30218.7 |
| 458. | c10h20qjFqE=>oh+c10h19oEqF | 6.14E+08 | 1.1 | 30218.7 |
| 459. | c10h20qjGqE=>oh+c10h19oEqG | 1.07E+08 | 1.1 | 22720.4 |
| 460. | c10h20qjHqE=>oh+c10h19oEqH | 1.85E+07 | 1.1 | 19721.4 |
| 461. | c10h20qjIqE=>oh+c10h19oEqI | 2.88E+06 | 1.1 | 18709.8 |
| 462. | c10h19oAqB=>oh+hco+c8h17hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 463. | c10h19oAqC=>oh+ch2hco+c7h15hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 464. | c10h19oAqD=>oh+ch2ch2hco+c6h13hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 465. | c10h19oAqE=>oh+c3h6hco-1+c5h11hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 466. | c10h19oBqA=>oh+ch2o+c8h17co | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 467. | c10h19oBqC=>oh+ch3co+c7h15hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 468. | c10h19oBqD=>oh+ch2coch3+c6h13hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 469. | c10h19oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c5h11hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 470. | c10h19oBqF=>oh+c3h6coch3-1+nc4h9hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 471. | c10h19oCqA=>oh+ch2o+nc7h15coch2 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 472. | c10h19oCqB=>oh+ch3hco+c7h15co | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 473. | c10h19oCqD=>oh+c2h5co+c6h13hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 474. | c10h19oCqE=>oh+c2h5coch2+c5h11hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 475. | c10h19oCqF=>oh+c2h5coc2h4p+nc4h9hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 476. | c10h19oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+nc3h7hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 477. | c10h19oDqA=>oh+ch2o+nc6h13coc2h4p | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 478. | c10h19oDqB=>oh+ch3hco+nc6h13coch2 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 479. | c10h19oDqC=>oh+c2h5hco+c6h13co | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 480. | c10h19oDqE=>oh+nc3h7co+c5h11hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 481. | c10h19oDqF=>oh+nc4h9hco+c3h7coch2 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 482. | c10h19oDqG=>oh+nc3h7hco+nc3h7coc2h4p | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 483. | c10h19oDqH=>oh+c2h5hco+nc3h7coc3h6-1 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 484. | c10h19oEqA=>oh+ch2o+nc5h11coc3h6-1 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 485. | c10h19oEqB=>oh+ch3hco+nc5h11coc2h4p | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 486. | c10h19oEqC=>oh+c2h5hco+nc5h11coch2 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 487. | c10h19oEqD=>oh+nc3h7hco+c5h11co | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 488. | c10h19oEqF=>oh+nc4h9co+nc4h9hco | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 489. | c10h19oEqG=>oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 490. | c10h19oEqH=>oh+c2h5hco+nc4h9coc2h4p | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 491. | c10h19oEqI=>oh+ch3hco+nc4h9coc3h6-1 | 5.00E+16 | 0.0 | 44500.0 |
| 492. | c10h20o-AB+h=>h2+acrol+Ac7h15 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 493. | c10h20o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac7h15 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 494. | c10h20o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac7h15 | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 495. | c10h20o-AB+h=>h2+ch2co+Ac8h17 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 496. | c10h20o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac8h17 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 497. | c10h20o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac8h17 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 498. | c10h20o-BC+h=>h2+mvk+Ac6h13 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 499. | c10h20o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac6h13 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 500. | c10h20o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac6h13 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 501. | c10h20o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac7h15 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 502. | c10h20o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac7h15 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 503. | c10h20o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac7h15 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 504. | c10h20o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+Ac5h11 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 505. | c10h20o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+Ac5h11 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 506. | c10h20o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+Ac5h11 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 507. | c10h20o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc6h13 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 508. | c10h20o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc6h13 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 509. | c10h20o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc6h13 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 510. | c10h20o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+pc4h9 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 511. | c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+pc4h9 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 512. | c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+pc4h9 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 513. | c10h20o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc5h11 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 514. | c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc5h11 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 515. | c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc5h11 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 516. | c10h20o-EF+h=>h2+c2h3coc4h9+nc3h7 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 517. | c10h20o-EF+oh=>h2o+c2h3coc4h9+nc3h7 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 518. | c10h20o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc4h9+nc3h7 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 519. | c10h20o-AC+h=>h2+c9h18+hco | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 520. | c10h20o-AC+oh=>h2o+c9h18+hco | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 521. | c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c9h18+hco | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 522. | c10h20o-AC+h=>h2+c2h4+c7h15co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 523. | c10h20o-AC+oh=>h2o+c2h4+c7h15co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 524. | c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c7h15co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 525. | c10h20o-BD+h=>h2+ch3co+c8h16 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 526. | c10h20o-BD+oh=>h2o+ch3co+c8h16 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 527. | c10h20o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c8h16 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 528. | c10h20o-BD+h=>h2+c3h6+c6h13co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 529. | c10h20o-BD+oh=>h2o+c3h6+c6h13co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 530. | c10h20o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c6h13co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 531. | c10h20o-CE+h=>h2+c7h14-1+c2h5co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 532. | c10h20o-CE+oh=>h2o+c7h14-1+c2h5co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 533. | c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2h5co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 534. | c10h20o-CE+h=>h2+c4h8+c5h11co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 535. | c10h20o-CE+oh=>h2o+c4h8+c5h11co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 536. | c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c5h11co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 537. | c10h20o-DF+h=>h2+c6h12-1+nc3h7co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 538. | c10h20o-DF+oh=>h2o+c6h12-1+nc3h7co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 539. | c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c6h12-1+nc3h7co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 540. | c10h20o-DF+h=>h2+c5h10+nc4h9co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 541. | c10h20o-DF+oh=>h2o+c5h10+nc4h9co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 542. | c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+nc4h9co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 543. | c10h20o-AD+h=>h2+c2h4+nc6h13coch2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 544. | c10h20o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc6h13coch2 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 545. | c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc6h13coch2 | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 546. | c10h20o-AD+h=>h2+c8h16+ch2hco | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 547. | c10h20o-AD+oh=>h2o+c8h16+ch2hco | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 548. | c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c8h16+ch2hco | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 549. | c10h20o-BE+h=>h2+c7h14-1+ch2coch3 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 550. | c10h20o-BE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2coch3 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 551. | c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2coch3 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 552. | c10h20o-BE+h=>h2+c3h6+nc5h11coch2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 553. | c10h20o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc5h11coch2 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 554. | c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc5h11coch2 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 555. | c10h20o-CF+h=>h2+c6h12-1+c2h5coch2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 556. | c10h20o-CF+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5coch2 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 557. | c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5coch2 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 558. | c10h20o-CF+h=>h2+c4h8+nc4h9coch2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 559. | c10h20o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc4h9coch2 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 560. | c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9coch2 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 561. | c10h20o-DG+h=>h2+c5h10+c3h7coch2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 562. | c10h20o-DG+oh=>h2o+c5h10+c3h7coch2 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 563. | c10h20o-DG+ho2=>h2o2+c5h10+c3h7coch2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 564. | c10h20o-AE+h=>h2+c7h14-1+ch2ch2hco | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 565. | c10h20o-AE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2ch2hco | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 566. | c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2ch2hco | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 567. | c10h20o-AE+h=>h2+c2h4+nc5h11coc2h4p | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 568. | c10h20o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc5h11coc2h4p | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 569. | c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11coc2h4p | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 570. | c10h20o-BF+h=>h2+Fc10h19oB | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 571. | c10h20o-BF+oh=>h2o+Fc10h19oB | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 572. | c10h20o-BF+ho2=>h2o2+Fc10h19oB | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 573. | c10h20o-BF+h=>h2+c3h6+nc4h9coc2h4p | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 574. | c10h20o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc4h9coc2h4p | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 575. | c10h20o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9coc2h4p | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 576. | c10h20o-CG+h=>h2+Gc10h19oC | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 577. | c10h20o-CG+oh=>h2o+Gc10h19oC | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 578. | c10h20o-CG+ho2=>h2o2+Gc10h19oC | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 579. | c10h20o-CG+h=>h2+c4h8+nc3h7coc2h4p | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 580. | c10h20o-CG+oh=>h2o+c4h8+nc3h7coc2h4p | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 581. | c10h20o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7coc2h4p | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 582. | ch3coc2h4p+c6h12-1=Fc10h19oB | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 583. | nc3h7+ch3coc5h9-1=Fc10h19oB | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 584. | c2h5coc2h4p+c5h10=Gc10h19oC | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 585. | c2h5+c2h5coc5h9-1=Gc10h19oC | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 586. | c10h20-1=ac3h5+Ac7h15 | 2.50E+16 | 0.0 | 70000.0 |
| 587. | c10h20-1=Dc4h7-1+Ac6h13 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 588. | c10h20-1=Ec5h9-1+Ac5h11 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 589. | c10h20-1=Fc6h11-1+pc4h9 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 590. | Cc10h19-1+h=c10h20-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 591. | Dc10h19-2+h=c10h20-2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 592. | Ec10h19-3+h=c10h20-3 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 593. | Fc10h19-4+h=c10h20-4 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 594. | c10h20-1+ho2=>oh+ch2o+c9h18 | 2.50E+12 | 1.0 | 25000.0 |
| 595. | c10h20-2+ho2=>oh+ch3hco+c8h16 | 2.50E+12 | 1.0 | 25000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 596. | c10h20-2+ho2=>oh+c2h4+c7h15hco | 2.50E+12 | 1.0 | 25000.0 |
| 597. | c10h20-3+ho2=>oh+c2h5hco+c7h14-1 | 2.50E+12 | 1.0 | 25000.0 |
| 598. | c10h20-3+ho2=>oh+c3h6+c6h13hco | 2.50E+12 | 1.0 | 25000.0 |
| 599. | c10h20-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c6h12-1 | 2.50E+12 | 1.0 | 25000.0 |
| 600. | c10h20-4+ho2=>oh+c4h8+c5h11hco | 2.50E+12 | 1.0 | 25000.0 |
| 601. | c10h20-5+ho2=>oh+c5h10+nc4h9hco | 5.00E+12 | 1.0 | 25000.0 |
| 602. | c10h20-1+oh=ch2o+Ac9h19 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 603. | c10h20-1+oh=ch3+c8h17hco | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 604. | c10h20-2+oh=ch3hco+Ac8h17 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 605. | c10h20-2+oh=c2h5+c7h15hco | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 606. | c10h20-3+oh=c2h5hco+Ac7h15 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 607. | c10h20-3+oh=nc3h7+c6h13hco | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 608. | c10h20-4+oh=nc3h7hco+Ac6h13 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 609. | c10h20-4+oh=pc4h9+c5h11hco | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 610. | c10h20-5+oh=Ac5h11+nc4h9hco | 2.80E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 611. | c10h20-1+o=ch2o+c9h18 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 612. | c10h20-2+o=ch3hco+c8h16 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 613. | c10h20-2+o=c2h4+c7h15hco | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 614. | c10h20-3+o=c2h5hco+c7h14-1 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 615. | c10h20-3+o=c3h6+c6h13hco | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 616. | c10h20-4+o=nc3h7hco+c6h12-1 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 617. | c10h20-4+o=c4h8+c5h11hco | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 618. | c10h20-5+o=c5h10+nc4h9hco | 6.80E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 619. | c10h20-1+ho2=oh+c10h20o-AB | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 620. | c10h20-2+ho2=oh+c10h20o-BC | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 621. | c10h20-3+ho2=oh+c10h20o-CD | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 622. | c10h20-4+ho2=oh+c10h20o-DE | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 623. | c10h20-5+ho2=oh+c10h20o-EF | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 624. | c10h20-1+h=h2+Cc10h19-1 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 625. | c10h20-1+oh=h2o+Cc10h19-1 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 626. | c10h20-1+ho2=h2o2+Cc10h19-1 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 627. | c10h20-1+ch3=ch4+Cc10h19-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 628. | c10h20-1+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 629. | c10h20-1+c2h5=c2h6+Cc10h19-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 630. | c10h20-1+o=oh+Cc10h19-1 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 631. | c10h20-2+h=h2+Cc10h19-1 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 632. | c10h20-2+oh=h2o+Cc10h19-1 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 633. | c10h20-2+ho2=h2o2+Cc10h19-1 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 634. | c10h20-2+ch3=ch4+Cc10h19-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 635. | c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 636. | c10h20-2+c2h5=c2h6+Cc10h19-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 637. | c10h20-2+o=oh+Cc10h19-1 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 638. | c10h20-2+h=h2+Dc10h19-2 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 639. | c10h20-2+oh=h2o+Dc10h19-2 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 640. | c10h20-2+ho2=h2o2+Dc10h19-2 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 641. | c10h20-2+ch3=ch4+Dc10h19-2 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 642. | c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 643. | c10h20-2+c2h5=c2h6+Dc10h19-2 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 644. | c10h20-2+o=oh+Dc10h19-2 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 645. | c10h20-3+h=h2+Dc10h19-2 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 646. | c10h20-3+oh=h2o+Dc10h19-2 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 647. | c10h20-3+ho2=h2o2+Dc10h19-2 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 648. | c10h20-3+ch3=ch4+Dc10h19-2 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 649. | c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 650. | c10h20-3+c2h5=c2h6+Dc10h19-2 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 651. | c10h20-3+o=oh+Dc10h19-2 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 652. | c10h20-3+h=h2+Ec10h19-3 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 653. | c10h20-3+oh=h2o+Ec10h19-3 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 654. | c10h20-3+ho2=h2o2+Ec10h19-3 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 655. | c10h20-3+ch3=ch4+Ec10h19-3 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 656. | c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 657. | c10h20-3+c2h5=c2h6+Ec10h19-3 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 658. | c10h20-3+o=oh+Ec10h19-3 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 659. | c10h20-4+h=h2+Ec10h19-3 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 660. | c10h20-4+oh=h2o+Ec10h19-3 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 661. | c10h20-4+ho2=h2o2+Ec10h19-3 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 662. | c10h20-4+ch3=ch4+Ec10h19-3 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 663. | c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 664. | c10h20-4+c2h5=c2h6+Ec10h19-3 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 665. | c10h20-4+o=oh+Ec10h19-3 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 666. | c10h20-4+h=h2+Fc10h19-4 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 667. | c10h20-4+oh=h2o+Fc10h19-4 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 668. | c10h20-4+ho2=h2o2+Fc10h19-4 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 669. | c10h20-4+ch3=ch4+Fc10h19-4 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 670. | c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 671. | c10h20-4+c2h5=c2h6+Fc10h19-4 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 672. | c10h20-4+o=oh+Fc10h19-4 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 673. | c10h20-5+h=h2+Fc10h19-4 | 3.40E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 674. | c10h20-5+oh=h2o+Fc10h19-4 | 6.20E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 675. | c10h20-5+ho2=h2o2+Fc10h19-4 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 676. | c10h20-5+ch3=ch4+Fc10h19-4 | 4.40E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 677. | c10h20-5+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4 | 4.40E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 678. | c10h20-5+c2h5=c2h6+Fc10h19-4 | 4.40E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 679. | c10h20-5+o=oh+Fc10h19-4 | 1.20E+11 | 0.7 | 7682.0 |
| 680. | c10h20-1+oh=c10h20rohAB | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 681. | c10h20rohAB+o2=c10h20qjohAB | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 682. | c10h20qjohAB=>oh+ch2o+c8h17hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 683. | c10h20-2+oh=c10h20rohBC | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 684. | c10h20rohBC+o2=c10h20qjohBC | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 685. | c10h20qjohBC=>oh+ch3hco+c7h15hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 686. | c10h20-3+oh=c10h20rohCD | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 687. | c10h20rohCD+o2=c10h20qjohCD | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 688. | c10h20qjohCD=>oh+c2h5hco+c6h13hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 689. | c10h20-4+oh=c10h20rohDE | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 690. | c10h20rohDE+o2=c10h20qjohDE | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 691. | c10h20qjohDE=>oh+nc3h7hco+c5h11hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 692. | c10h20-5+oh=c10h20rohEF | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 693. | c10h20rohEF+o2=c10h20qjohEF | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 694. | c10h20qjohEF=>oh+nc4h9hco+nc4h9hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 695. | Cc10h19-1=c4h6+Ac6h13 | 1.34E+15 | -0.5 | 38320.0 |
| 696. | Dc10h19-2=c5h8-13+Ac5h11 | 2.50E+13 | 0.0 | 35000.0 |
| 697. | Ec10h19-3=c6h10-13+pc4h9 | 2.50E+13 | 0.0 | 35000.0 |
| 698. | Fc10h19-4=c7h12-13+nc3h7 | 2.50E+13 | 0.0 | 35000.0 |
| 699. | c9h19hco+h=h2+c9h19co | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 700. | c9h19hco+oh=h2o+c9h19co | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 701. | c9h19hco+ho2=h2o2+c9h19co | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 702. | c9h19hco+ch3=ch4+c9h19co | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 703. | c9h19hco+c2h5=c2h6+c9h19co | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 704. | c9h19hco+o2=ho2+c9h19co | 1.00E+13 | 0.0 | 40700.0 |
| 705. | c9h19co+M=co+Ac9h19+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 706. | c9h19co+ho2=>co2+oh+Ac9h19 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 707. | c9h20+h=>h2+ch3+4c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 708. | c9h20+oh=>h2o+ch3+4c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 709. | c9h20+ho2=>h2o2+ch3+4c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 710. | c9h20+ch3=>ch4+ch3+4c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 711. | c9h20+ch3o2=>ch3o2h+ch3+4c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 712. | c9h20+c2h5=>c2h6+ch3+4c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 713. | Ac9h19=Ac7h15+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 714. | Bc9h19=Ac6h13+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 715. | Cc9h19=Ac5h11+c4h8 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 716. | Cc9h19=ch3+c8h16 | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 717. | Dc9h19=pc4h9+c5h10 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 718. Dc9h19=c2h5+c7h14-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 29700.0 |
| 719. Ec9h19=nc3h7+c6h12-1 | 4.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 720. Ac9h19=h+c9h18 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 721. Bc9h19=h+c9h18 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 722. Bc9h19=h+c9h18 | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 723. Cc9h19=h+c9h18 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 724. Dc9h19=h+c9h18 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 725. Ec9h19=h+c9h18 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 726. Ac9h19+o2=c9h18+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 727. Bc9h19+o2=c9h18+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 728. Bc9h19+o2=c9h18+ho2 | 8.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 729. Cc9h19+o2=c9h18+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 730. Dc9h19+o2=c9h18+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 731. Ec9h19+o2=c9h18+ho2 | 3.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 732. Ac9h19=Dc9h19 | 4.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| 733. Bc9h19=Ec9h19 | 2.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| 734. Ac9h19=Ec9h19 | 2.00E+11 | 0.0 | 11100.0 |
| 735. Bc9h19=Dc9h19 | 2.00E+11 | 0.0 | 11100.0 |
| 736. Bc9h19=Cc9h19 | 2.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| 737. c9h18+ch3=Ac7h15+c3h6 | 9.60E+10 | 0.0 | 8000.0 |
| 738. c9h18+oh=ch3+c7h15hco | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 739. c9h18+oh=ch2o+Ac8h17 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 740. c9h18+o=>ch2co+ch3+h+3c2h4 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 741. c9h18=Ac6h13+ac3h5 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 742. c9h18+o2=ho2+Cc9h17-1 | 4.00E+12 | 0.0 | 40000.0 |
| 743. c9h18+ho2=h2o2+Cc9h17-1 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 744. c9h18+o=oh+Cc9h17-1 | 4.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 745. c9h18+h=h2+Cc9h17-1 | 6.55E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 746. c9h18+oh=h2o+Cc9h17-1 | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 747. c9h18+ch3=ch4+Cc9h17-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 748. c9h18+c2h3=c2h4+Cc9h17-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 749. c9h18+nc3h7=c3h8+Cc9h17-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 750. Cc9h17-1=c4h6+Ac5h11 | 1.34E+15 | -0.5 | 38320.0 |
| 751. Cc9h17-1+h=c9h18 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 752. Cc9h17-1+ho2=oh+acrol+Ac6h13 | 1.00E+12 | 0.0 | 8000.0 |
| 753. c8h17hco+h=h2+c8h17co | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 754. c8h17hco+oh=h2o+c8h17co | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 755. c8h17hco+ho2=h2o2+c8h17co | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 756. c8h17hco+ch3=ch4+c8h17co | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 757. c8h17hco+c2h5=c2h6+c8h17co | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 758. c8h17co+M=co+Ac8h17+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 759. c8h17co+ho2=>co2+oh+Ac8h17 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 760. c8h15hco=hc8h15-1+hco | 7.25E+16 | 0.0 | 82400.0 |
| 761. c8h15hco+o2=c8h15co+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 762. c8h15hco+ho2=c8h15co+h2o2 | 1.70E+12 | 0.0 | 10700.0 |
| 763. c8h15hco+oh=c8h15co+h2o | 2.35E+10 | 0.7 | -1113.0 |
| 764. c8h15hco+o=c8h15co+oh | 5.85E+12 | 0.0 | 1808.0 |
| 765. c8h15hco+h=c8h15co+h2 | 5.54E+02 | 3.5 | 5167.0 |
| 766. c8h15hco+ch3=c8h15co+ch4 | 2.25E+00 | 4.0 | 8285.0 |
| 767. c8h15hco+c2h5=c8h15co+c2h6 | 1.64E+00 | 3.6 | 9141.0 |
| 768. c8h15hco+hco=c8h15co+ch2o | 4.70E+04 | 2.7 | 18235.0 |
| 769. c8h15hco+c2h3=c8h15co+c2h4 | 8.50E+09 | 0.0 | 6000.0 |
| 770. c8h15co=hc8h15-1+co | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 771. c8h15co+ho2=>co2+oh+hc8h15-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 772. c8h18+h=>h2+c2h5+3c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 773. c8h18+oh=>h2o+c2h5+3c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 774. c8h18+ho2=>h2o2+c2h5+3c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 775. c8h18+ch3=>ch4+c2h5+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 776. c8h18+ch3o2=>ch3o2h+c2h5+3c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 777. c8h18+c2h5=>c2h6+c2h5+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 778. Ac8h17=Ac6h13+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 779. Dc8h17=nc3h7+c5h10 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 780. Dc8h17=c2h5+c6h12-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 781. Cc8h17=pc4h9+c4h8 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 782. Cc8h17=ch3+c7h14-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 783. Bc8h17=Ac5h11+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 784. Ac8h17=h+c8h16 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 785. Dc8h17=h+c8h16 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 786. Dc8h17=h+c8h16 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 787. Cc8h17=h+c8h16 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 788. Cc8h17=h+c8h16 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 789. Bc8h17=h+c8h16 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 790. Bc8h17=h+c8h16 | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 791. Ac8h17+o2=c8h16+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 792. Dc8h17+o2=c8h16+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 793. Dc8h17+o2=c8h16+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 794. Cc8h17+o2=c8h16+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 795. Cc8h17+o2=c8h16+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 796. Bc8h17+o2=c8h16+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 797. Bc8h17+o2=c8h16+ho2 | 8.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 798. Bc8h17=Dc8h17 | 2.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| 799. Ac8h17=Dc8h17 | 2.00E+11 | 0.0 | 11100.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 800. Ac8h17=Dc8h17 | 2.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 801. Bc8h17=Cc8h17 | 2.00E+11 | 0.0 | 11100.0 |
| 802. Ac8h17=Cc8h17 | 2.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| 803. Ac8h17+o2=c8h17qjA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 804. Bc8h17+o2=c8h17qjB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 805. Cc8h17+o2=c8h17qjC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 806. Dc8h17+o2=c8h17qjD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 807. c8h17qjA=c8h16rBqA | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 808. c8h17qjA=c8h16rCqA | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 809. c8h17qjA=c8h16rDqA | 9.90E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 810. c8h17qjA=c8h16rEqA | 1.70E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 811. c8h17qjB=c8h16rAqB | 5.00E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 812. c8h17qjB=c8h16rCqB | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 813. c8h17qjB=c8h16rDqB | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 814. c8h17qjB=c8h16rEqB | 9.90E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 815. c8h17qjB=c8h16rFqB | 1.70E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 816. c8h17qjC=c8h16rBqC | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 817. c8h17qjC=c8h16rAqC | 8.60E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 818. c8h17qjC=c8h16rDqC | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 819. c8h17qjC=c8h16rEqC | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 820. c8h17qjC=c8h16rFqC | 9.90E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 821. c8h17qjC=c8h16rGqC | 1.70E+07 | 1.0 | 21000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 822. | c8h17qjD=c8h16rCqD | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 823. | c8h17qjD=c8h16rBqD | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 824. | c8h17qjD=c8h16rAqD | 1.50E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 825. | c8h17qjD=c8h16rEqD | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 826. | c8h17qjD=c8h16rFqD | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 827. | c8h17qjD=c8h16rGqD | 9.90E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 828. | c8h17qjD=c8h16rHqD | 2.50E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 829. | c8h17qjA+ho2=nc8h17o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 830. | c8h17qjB+ho2=nc8h17o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 831. | c8h17qjC+ho2=nc8h17o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 832. | c8h17qjD+ho2=nc8h17o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 833. | c8h16rBqA+o2=c8h16qjBqA | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 834. | c8h16rCqA+o2=c8h16qjCqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 835. | c8h16rDqA+o2=c8h16qjDqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 836. | c8h16rEqA+o2=c8h16qjEqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 837. | c8h16rAqB+o2=c8h16qjAqB | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 838. | c8h16rCqB+o2=c8h16qjCqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 839. | c8h16rDqB+o2=c8h16qjDqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 840. | c8h16rEqB+o2=c8h16qjEqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 841. | c8h16rFqB+o2=c8h16qjFqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 842. | c8h16rAqC+o2=c8h16qjAqC | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 843. | c8h16rBqC+o2=c8h16qjBqC | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 844. | c8h16rDqC+o2=c8h16qjDqC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 845. | c8h16rEqC+o2=c8h16qjEqC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 846. | c8h16rFqC+o2=c8h16qjFqC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 847. | c8h16rGqC+o2=c8h16qjGqC | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 848. | c8h16rAqD+o2=c8h16qjAqD | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 849. | c8h16rBqD+o2=c8h16qjBqD | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 850. | c8h16rCqD+o2=c8h16qjCqD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 851. | c8h16rEqD+o2=c8h16qjEqD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 852. | c8h16rFqD+o2=c8h16qjFqD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 853. | c8h16rGqD+o2=c8h16qjGqD | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 854. | c8h16rHqD+o2=c8h16qjHqD | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 855. | c8h16rAqC=>oh+c2h4+c5h11hco | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 856. | c8h16rCqA=>oh+ch2o+c7h14-1 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 857. | c8h16rBqD=>oh+c3h6+nc4h9hco | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 858. | c8h16rDqB=>oh+c6h12-1+ch3hco | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 859. | c8h16rFqD=>oh+c4h8+nc3h7hco | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 860. | c8h16rEqC=>oh+c2h5hco+c5h10 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 861. | c8h16rBqA=oh+c8h16o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 862. | c8h16rCqA=oh+c8h16o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 863. | c8h16rDqA=oh+c8h16o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 864. | c8h16rEqA=oh+c8h16o#6 | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 865. | c8h16rAqB=oh+c8h16o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 866. | c8h16rCqB=oh+c8h16o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 867. | c8h16rDqB=oh+c8h16o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 868. | c8h16rEqB=oh+c8h16o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 869. | c8h16rFqB=oh+c8h16o#6 | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 870. | c8h16rBqC=oh+c8h16o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 871. | c8h16rAqC=oh+c8h16o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 872. | c8h16rDqC=oh+c8h16o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 873. | c8h16rEqC=oh+c8h16o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 874. | c8h16rFqC=oh+c8h16o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 875. | c8h16rGqC=oh+c8h16o#6 | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 876. | c8h16rCqD=oh+c8h16o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 877. | c8h16rBqD=oh+c8h16o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 878. | c8h16rAqD=oh+c8h16o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 879. | c8h16rEqD=oh+c8h16o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 880. | c8h16rFqD=oh+c8h16o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 881. | c8h16rGqD=oh+c8h16o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 882. | c8h16rHqD=oh+c8h16o#6 | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 883. | c8h16rAqB=ho2+c8h16 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 884. | c8h16rBqA=ho2+c8h16 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 885. | c8h16rBqC=ho2+c8h16 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 886. | c8h16rCqB=ho2+c8h16 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 887. | c8h16rCqD=ho2+c8h16 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 888. | c8h16rDqC=ho2+c8h16 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 889. | c8h16rEqD=ho2+c8h16 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 890. | c8h16rBqA=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 891. | c8h16rCqA=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 892. | c8h16rDqA=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 893. | c8h16rEqA=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 894. | c8h16rCqD=h+c8h15o2h | 4.50E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 895. | c8h16rBqD=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 896. | c8h16rAqD=h+c8h15o2h | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 897. | c8h16rEqD=h+c8h15o2h | 4.50E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 898. | c8h16rFqD=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 899. | c8h16rGqD=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 900. | c8h16rHqD=h+c8h15o2h | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 901. | c8h16rBqC=h+c8h15o2h | 4.50E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 902. | c8h16rAqC=h+c8h15o2h | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 903. | c8h16rDqC=h+c8h15o2h | 4.50E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 904. | c8h16rEqC=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 905. | c8h16rFqC=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 906. | c8h16rGqC=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 907. | c8h16rAqB=h+c8h15o2h | 1.50E+13 | 0.0 | 37500.0 |
| 908. | c8h16rCqB=h+c8h15o2h | 4.50E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 909. | c8h16rDqB=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 910. | c8h16rEqB=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 911. | c8h16rFqB=h+c8h15o2h | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 912. | c8h16rBqA+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 913. | c8h16rCqA+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 914. | c8h16rDqA+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 915. | c8h16rEqA+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 916. | c8h16rAqB+o2=c8h15o2h+ho2 | 6.40E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 917. | c8h16rCqB+o2=c8h15o2h+ho2 | 2.54E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 918. | c8h16rDqB+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 919. | c8h16rEqB+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 920. | c8h16rFqB+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 921. | c8h16rBqC+o2=c8h15o2h+ho2 | 1.45E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 922. | c8h16rAqC+o2=c8h15o2h+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 923. | c8h16rDqC+o2=c8h15o2h+ho2 | 2.54E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 924. | c8h16rEqC+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 925. | c8h16rFqC+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 926. | c8h16rGqC+o2=c8h15o2h+ho2 | 2.70E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 927. | c8h16rCqD+o2=c8h15o2h+ho2 | 2.54E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 928. | c8h16rBqD+o2=c8h15o2h+ho2 | 2.70E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 929. | c8h16rAqD+o2=c8h15o2h+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 930. | c8h16rEqD+o2=c8h15o2h+ho2 | 2.54E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 931. | c8h16rFqD+o2=c8h15o2h+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 932. | c8h16rGqD+o2=c8h15o2h+ho2 | 2.70E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 933. | c8h16rHqD+o2=c8h15o2h+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 934. | c8h16qjBqA=oh+c8h15oq | 3.30E+09 | 1.0 | 30500.0 |
| 935. | c8h16qjCqA=oh+c8h15oq | 5.70E+08 | 1.0 | 23000.0 |
| 936. | c8h16qjDqA=oh+c8h15oq | 9.90E+07 | 1.0 | 20000.0 |
| 937. | c8h16qjEqA=oh+c8h15oq | 1.70E+07 | 1.0 | 19000.0 |
| 938. | c8h16qjCqD=oh+c8h15oq | 1.70E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 939. | c8h16qjBqD=oh+c8h15oq | 2.90E+08 | 1.0 | 20000.0 |
| 940. | c8h16qjAqD=oh+c8h15oq | 4.90E+07 | 1.0 | 17000.0 |
| 941. | c8h16qjEqD=oh+c8h15oq | 1.70E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 942. | c8h16qjFqD=oh+c8h15oq | 2.90E+08 | 1.0 | 20000.0 |
| 943. | c8h16qjGqD=oh+c8h15oq | 4.90E+07 | 1.0 | 17000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 944. | c8h16qjHqD=oh+c8h15oq | 8.50E+06 | 1.0 | 16000.0 |
| 945. | c8h16qjBqC=oh+c8h15oq | 1.70E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 946. | c8h16qjAqC=oh+c8h15oq | 2.90E+08 | 1.0 | 20000.0 |
| 947. | c8h16qjDqC=oh+c8h15oq | 1.70E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 948. | c8h16qjEqC=oh+c8h15oq | 2.90E+08 | 1.0 | 20000.0 |
| 949. | c8h16qjFqC=oh+c8h15oq | 4.90E+07 | 1.0 | 17000.0 |
| 950. | c8h16qjGqC=oh+c8h15oq | 8.50E+06 | 1.0 | 16000.0 |
| 951. | c8h16qjAqB=oh+c8h15oq | 1.70E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 952. | c8h16qjCqB=oh+c8h15oq | 1.70E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 953. | c8h16qjDqB=oh+c8h15oq | 2.90E+08 | 1.0 | 20000.0 |
| 954. | c8h16qjEqB=oh+c8h15oq | 4.90E+07 | 1.0 | 17000.0 |
| 955. | c8h16qjFqB=oh+c8h15oq | 8.50E+06 | 1.0 | 16000.0 |
| 956. | c8h15oq=>oh+ch2ch2hco+nc4h9hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 957. | c8h15oq=>oh+choch2ch2cho+pc4h9 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 958. | c8h15oq=>oh+ch2hco+c5h11hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 959. | c8h15oq=>oh+hcoch2hco+Ac5h11 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 960. | c8h15oq=>oh+ch3hco+ch2co+pc4h9 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 961. | c8h15oq=>oh+c2h5hco+c3h7coch2 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 962. | c8h15oq=>oh+c2h4+ch3hco+nc3h7co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 963. | nc8h17o2h=>oh+ch3hco+2c2h4+c2h5 | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 964. | c8h15o2h=>oh+ch3hco+2c2h4+c2h3 | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 965. | c8h16o#3+h=>h2+ch2co+c2h5+2c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 966. | c8h16o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5+2c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 967. | c8h16o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 968. | c8h16o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 969. | c8h16o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 970. | c8h16o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 971. | c8h16o#3+o=>oh+ch2hco+3c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 972. | c8h16o#4+h=>h2+ch2hco+3c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 973. | c8h16o#4+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 974. | c8h16o#4+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 975. | c8h16o#4+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 976. | c8h16o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 977. | c8h16o#4+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 978. | c8h16o#4+o=>oh+ch2hco+3c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 979. | c8h16o#5+h=>h2+ch2hco+3c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 980. | c8h16o#5+oh=>h2o+c6h12-1+ch2hco | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 981. | c8h16o#5+oh=>h2o+ch2co+pc4h9+c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 982. | c8h16o#5+oh=>h2o+c5h10+ch2coch3 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 983. | c8h16o#5+oh=>h2o+c3h6+c3h7coch2 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 984. | c8h16o#5+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 985. | c8h16o#5+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 986. | c8h16o#5+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 987. | c8h16o#5+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 988. | c8h16o#5+o=>oh+ch2hco+3c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 989. | c8h16o#6+h=>h2+ch2hco+3c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 990. | c8h16o#6+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 991. | c8h16o#6+ho2=>h2o2+ch2hco+3c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 992. | c8h16o#6+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 993. | c8h16o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 994. | c8h16o#6+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 995. | c8h16o#6+o=>oh+ch2hco+3c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 996. | c8h16+ch3=Ac6h13+c3h6 | 9.60E+10 | 0.0 | 8000.0 |
| 997. | c8h16+oh=ch3+c6h13hco | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 998. | c8h16+oh=ch2o+Ac7h15 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 999. | c8h16+o=>ch2co+c2h5+h+2c2h4 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 1000. | c8h16+ho2=oh+c8h16o#3 | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 1001. | c8h16+ho2=h2o2+Cc8h15-1 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 1002. | c8h16+o=oh+Cc8h15-1 | 4.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 1003. | c8h16+h=h2+Cc8h15-1 | 6.55E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 1004. | c8h16+oh=h2o+Cc8h15-1 | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 1005. | c8h16+ch3=ch4+Cc8h15-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1006. | c8h16+c2h3=c2h4+Cc8h15-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1007. | c8h16+nc3h7=c3h8+Cc8h15-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 1008. | Cc8h15-1=c4h6+pc4h9 | 1.34E+15 | -0.5 | 38320.0 |
| 1009. | Cc8h15-1+h=c8h16 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1010. | Cc8h15-1+ho2=>oh+acrol+Ac5h11 | 1.00E+12 | 0.0 | 8000.0 |
| 1011. | hc8h15-1=Fc6h11-1+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 29400.0 |
| 1012. | ac3h5+Ec5h9-1=c8h14 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1013. | Dc4h7-1+Dc4h7-1=c8h14 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1014. | c7h15hco+h=h2+c7h15co | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 1015. | c7h15hco+oh=h2o+c7h15co | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 1016. | c7h15hco+ho2=h2o2+c7h15co | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 1017. | c7h15hco+ch3=ch4+c7h15co | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 1018. | c7h15hco+c2h5=c2h6+c7h15co | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 1019. | c7h15co+M=co+Ac7h15+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 1020. | c7h15co+ho2=>co2+oh+Ac7h15 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1021. | c7h16=h+Ac7h15 | 1.34E+88 | -21.2 | 142800.0 |
| 1022. | c7h16=h+Bc7h15 | 6.50E+87 | -21.0 | 139500.0 |
| 1023. | c7h16=h+Cc7h15 | 6.50E+87 | -21.0 | 139500.0 |
| 1024. | c7h16=h+Dc7h15 | 3.25E+87 | -21.0 | 139500.0 |
| 1025. | c7h16=Ac6h13+ch3 | 2.93E+73 | -16.6 | 118900.0 |
| 1026. | c7h16=Ac5h11+c2h5 | 8.10E+77 | -17.6 | 120400.0 |
| 1027. | c7h16=pc4h9+nc3h7 | 1.42E+78 | -17.7 | 120700.0 |
| 1028. | c7h16+o2=Ac7h15+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 1029. | c7h16+o2=Bc7h15+ho2 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 1030. | c7h16+o2=Cc7h15+ho2 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 1031. | c7h16+o2=Dc7h15+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 1032. | c7h16+oh=h2o+Ac7h15 | 1.41E+07 | 1.8 | 973.7 |
| 1033. | c7h16+oh=h2o+Bc7h15 | 1.99E+06 | 2.0 | -596.2 |
| 1034. | c7h16+oh=h2o+Cc7h15 | 2.25E+06 | 2.0 | -1391.0 |
| 1035. | c7h16+oh=h2o+Dc7h15 | 1.12E+06 | 2.0 | -1391.0 |
| 1036. | c7h16+ho2=h2o2+Ac7h15 | 3.60E+04 | 2.5 | 16683.0 |
| 1037. | c7h16+ho2=h2o2+Bc7h15 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 1038. | c7h16+ho2=h2o2+Cc7h15 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 1039. | c7h16+ho2=h2o2+Dc7h15 | 2.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 1040. | c7h16+h=h2+Ac7h15 | 5.70E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 1041. | c7h16+h=h2+Bc7h15 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1042. | c7h16+h=h2+Cc7h15 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1043. | c7h16+h=h2+Dc7h15 | 9.00E+06 | 2.0 | 5000.0 |
| 1044. | o+c7h16=oh+Ac7h15 | 1.00E+14 | 0.0 | 7850.0 |
| 1045. | o+c7h16=oh+Bc7h15 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1046. | o+c7h16=oh+Cc7h15 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1047. | o+c7h16=oh+Dc7h15 | 2.60E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1048. | c7h16+ch3=ch4+Ac7h15 | 6.00E-01 | 4.0 | 8200.0 |
| 1049. | c7h16+ch3=ch4+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1050. | c7h16+ch3=ch4+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1051. | c7h16+ch3=ch4+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1052. | c7h16+c2h5=c2h6+Ac7h15 | 6.00E+11 | 0.0 | 13500.0 |
| 1053. | c7h16+c2h5=c2h6+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1054. | c7h16+c2h5=c2h6+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1055. | c7h16+c2h5=c2h6+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1056. | c7h16+hco=ch2o+Ac7h15 | 2.00E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 1057. | c7h16+hco=ch2o+Bc7h15 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 1058. | c7h16+hco=ch2o+Cc7h15 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 1059. | c7h16+hco=ch2o+Dc7h15 | 1.10E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 1060. | c7h16+ch3o=ch3oh+Ac7h15 | 3.20E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 1061. | c7h16+ch3o=ch3oh+Bc7h15 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 1062. | c7h16+ch3o=ch3oh+Cc7h15 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 1063. | c7h16+ch3o=ch3oh+Dc7h15 | 1.45E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 1064. | c7h16+ch2oh=ch3oh+Ac7h15 | 2.00E+02 | 3.0 | 14000.0 |
| 1065. | c7h16+ch2oh=ch3oh+Bc7h15 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1066. | c7h16+ch2oh=ch3oh+Cc7h15 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |
| 1067. | c7h16+ch2oh=ch3oh+Dc7h15 | 6.00E+01 | 3.0 | 12000.0 |
| 1068. | c7h16+ch3o2=ch3o2h+Ac7h15 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 1069. | c7h16+ch3o2=ch3o2h+Bc7h15 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1070. | c7h16+ch3o2=ch3o2h+Cc7h15 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1071. | c7h16+ch3o2=ch3o2h+Dc7h15 | 3.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1072. | c7h16+ch2hco=ch3hco+Ac7h15 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1073. | c7h16+ch2hco=ch3hco+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1074. | c7h16+ch2hco=ch3hco+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1075. | c7h16+ch2hco=ch3hco+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1076. | c7h16+ch3co=ch3hco+Ac7h15 | 3.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 1077. | c7h16+ch3co=ch3hco+Bc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 1078. | c7h16+ch3co=ch3hco+Cc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 1079. | c7h16+ch3co=ch3hco+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 1080. | c7h16+nc3h7=c3h8+Ac7h15 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1081. | c7h16+nc3h7=c3h8+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1082. | c7h16+nc3h7=c3h8+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1083. | c7h16+nc3h7=c3h8+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1084. | c7h16+pc4h9=c4h10+Ac7h15 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1085. | c7h16+pc4h9=c4h10+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1086. | c7h16+pc4h9=c4h10+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1087. | c7h16+pc4h9=c4h10+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1088. | c7h16+Ac5h11=c5h12+Ac7h15 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1089. | c7h16+Ac5h11=c5h12+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1090. | c7h16+Ac5h11=c5h12+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1091. | c7h16+Ac5h11=c5h12+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1092. | c7h16+Ac6h13=c6h14+Ac7h15 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1093. | c7h16+Ac6h13=c6h14+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1094. | c7h16+Ac6h13=c6h14+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1095. | c7h16+Ac6h13=c6h14+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1096. | c7h16+Ac7h15=c7h16+Bc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 1097. | c7h16+Ac7h15=c7h16+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 1098. | c7h16+Ac7h15=c7h16+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 1099. | c7h16+Bc7h15=c7h16+Cc7h15 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 1100. | c7h16+Bc7h15=c7h16+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 1101. | c7h16+Cc7h15=c7h16+Dc7h15 | 2.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 1102. | Ac7h15=Ac5h11+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1103. | Bc7h15=pc4h9+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1104. | Cc7h15=nc3h7+c4h8 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1105. | Cc7h15=ch3+c6h12-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 1106. | Dc7h15=c2h5+c5h10 | 4.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1107. | Ac7h15=h+c7h14-1 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1108. | Bc7h15=h+c7h14-1 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1109. | Cc7h15=h+c7h14-1 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1110. | Dc7h15=h+c7h14-1 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1111. | Ac7h15+o2=c7h14-1+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1112. | Bc7h15+o2=c7h14-1+ho2 | 8.00E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1113. | Bc7h15+o2=c7h14-2+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1114. | Cc7h15+o2=c7h14-2+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1115. | Cc7h15+o2=c7h14-3+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1116. | Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2 | 3.80E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1117. | Ac7h15=Bc7h15 | 3.90E+07 | 0.9 | 18452.4 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.12E+07 | 1.1 | 19748.8 |
| 1118. | Ac7h15=Cc7h15 | 9.20E+07 | 1.0 | 12916.1 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.16E+07 | 1.1 | 14340.1 |
| 1119. | Ac7h15=Dc7h15 | 8.70E+08 | 0.9 | 18290.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.15E+09 | 1.0 | 19711.5 |
| 1120. | Bc7h15=Cc7h15 | 3.79E+08 | 1.1 | 18937.4 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.73E+08 | 0.9 | 19062.6 |
| 1121. | Bc7h15=Dc7h15 | 2.20E+09 | 1.1 | 38637.4 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+10 | 0.9 | 38762.6 |
| 1122. | Ac7h15+o2=c7h15qjA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1123. | Bc7h15+o2=c7h15qjB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1124. | Cc7h15+o2=c7h15qjC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1125. | Dc7h15+o2=c7h15qjD | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1126. | c7h15qjA=c7h14rBqA | 3.35E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1127. | c7h15qjA=c7h14rCqA | 5.75E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1128. | c7h15qjA=c7h14rDqA | 9.89E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 1129. | c7h15qjA=c7h14rEqA | 1.70E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 1130. | c7h15qjB=c7h14rAqB | 5.02E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 1131. | c7h15qjB=c7h14rCqB | 3.35E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1132. | c7h15qjB=c7h14rDqB | 5.75E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1133. | c7h15qjB=c7h14rEqB | 9.89E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 1134. | c7h15qjB=c7h14rFqB | 1.70E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 1135. | c7h15qjC=c7h14rAqC | 8.62E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 1136. | c7h15qjC=c7h14rBqC | 3.35E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1137. | c7h15qjC=c7h14rDqC | 3.35E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1138. | c7h15qjC=c7h14rEqC | 5.75E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1139. | c7h15qjC=c7h14rFqC | 9.89E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 1140. | c7h15qjC=c7h14rGqC | 2.55E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 1141. | c7h15qjD=c7h14rAqD | 2.97E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1142. | c7h15qjD=c7h14rBqD | 1.15E+09 | 1.0 | 25000.0 |
| 1143. | c7h15qjD=c7h14rCqD | 6.69E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1144. | c7h15qjA+ho2=>c7h15qA+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1145. | c7h15qjD+ho2=>c7h15qA+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1146. | c7h15qjC+ho2=>c7h15qA+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1147. | c7h15qjB+ho2=>c7h15qA+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1148. | c7h14rDqA=c5h10+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1149. | c7h14rEqA=c4h8+c3h6ooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1150. | c7h14rEqB=c4h8+c3h6ooh2-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1151. | c7h14rFqB=c3h6+c4h8rDqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1152. | c7h14rFqC=c3h6+c4h8rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1153. | c7h14rGqC=c2h4+c5h10rAqC | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1154. | c7h14rAqD=c2h4+c5h10rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1155. | c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1156. | c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1157. | c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1158. | c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1159. | c7h14rAqB+o2=c7h14qjAqB | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1160. | c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1161. | c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1162. | c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1163. | c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1164. | c7h14rAqC+o2=c7h14qjAqC | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1165. | c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1166. | c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1167. | c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1168. | c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1169. | c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1170. | c7h14rAqD+o2=c7h14qjAqD | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1171. | c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1172. | c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1173. | c7h14rAqC=>oh+c2h4+nc4h9hco | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1174. | c7h14rCqA=>oh+ch2o+c6h12-1 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1175. | c7h14rBqD=>oh+nc3h7hco+c3h6 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1176. | c7h14rDqB=>oh+ch3hco+c5h10 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1177. | c7h14rEqC=>oh+c2h5hco+c4h8 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1178. | c7h14rBqA=oh+c7h14o-AB | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1179. | c7h14rCqA=oh+c7h14o-AC | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1180. | c7h14rDqA=oh+c7h14o-AD | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1181. | c7h14rEqA=oh+c7h14o-AE | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1182. | c7h14rAqB=oh+c7h14o-AB | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1183. | c7h14rCqB=oh+c7h14o-BC | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1184. | c7h14rDqB=oh+c7h14o-BD | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1185. | c7h14rEqB=oh+c7h14o-BE | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1186. | c7h14rFqB=oh+c7h14o-BF | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 1187. | c7h14rBqC=oh+c7h14o-BC | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1188. | c7h14rAqC=oh+c7h14o-AC | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1189. | c7h14rDqC=oh+c7h14o-CD | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1190. | c7h14rEqC=oh+c7h14o-CE | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1191. | c7h14rFqC=oh+c7h14o-BE | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1192. | c7h14rGqC=oh+c7h14o-AE | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 1193. | c7h14rCqD=oh+c7h14o-CD | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1194. | c7h14rBqD=oh+c7h14o-BD | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1195. | c7h14rAqD=oh+c7h14o-AD | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1196. | c7h14rAqB=ho2+c7h14-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1197. | c7h14rBqA=ho2+c7h14-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1198. | c7h14rBqC=ho2+c7h14-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1199. | c7h14rCqB=ho2+c7h14-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1200. | c7h14rCqD=ho2+c7h14-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1201. | c7h14rDqC=ho2+c7h14-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1202. | c7h14qjBqA=>oh+c7h13oAqB | 3.35E+09 | 1.0 | 33500.0 |
| 1203. | c7h14qjCqA=>oh+c7h13oAqC | 5.75E+08 | 1.0 | 26000.0 |
| 1204. | c7h14qjDqA=>oh+c7h13oAqD | 9.89E+07 | 1.0 | 23000.0 |
| 1205. | c7h14qjEqA=>oh+c7h13oAqE | 1.70E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 1206. | c7h14qjAqB=>oh+c7h13oBqA | 1.67E+09 | 1.0 | 30500.0 |
| 1207. | c7h14qjCqB=>oh+c7h13oBqC | 1.67E+09 | 1.0 | 30500.0 |
| 1208. | c7h14qjDqB=>oh+c7h13oBqD | 2.88E+08 | 1.0 | 23000.0 |
| 1209. | c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBqE | 4.94E+07 | 1.0 | 20000.0 |
| 1210. | c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBqF | 8.50E+06 | 1.0 | 19000.0 |
| 1211. | c7h14qjAqC=>oh+c7h13oCqA | 2.88E+08 | 1.0 | 23000.0 |
| 1212. | c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB | 1.67E+09 | 1.0 | 30500.0 |
| 1213. | c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD | 1.67E+09 | 1.0 | 30500.0 |
| 1214. | c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE | 2.88E+08 | 1.0 | 23000.0 |
| 1215. | c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF | 4.94E+07 | 1.0 | 20000.0 |
| 1216. | c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG | 8.50E+06 | 1.0 | 19000.0 |
| 1217. | c7h14qjAqD=>oh+c7h13oDqA | 4.94E+07 | 1.0 | 20000.0 |
| 1218. | c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB | 2.88E+08 | 1.0 | 23000.0 |
| 1219. | c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC | 1.67E+09 | 1.0 | 30500.0 |
| 1220. | c7h15qA=>oh+ch2o+Ac6h13 | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 1221. | c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1222. | c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1223. | c7h13oAqC=>c2h5hco+nc3h7co+oh | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1224. | c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1225. | c7h13oAqE=>oh+c2h5hco+c3h6hco-1 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1226. | c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1227. | c7h13oBqC=>oh+ch3co+nc4h9hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1228. | c7h13oBqD=>oh+nc3h7hco+ch2coch3 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1229. | c7h13oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c2h5hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1230. | c7h13oBqF=>oh+ch3hco+c3h6coch3-1 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1231. | c7h13oCqA=>oh+ch2o+nc4h9coch2 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1232. | c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1233. | c7h13oCqD=>oh+c2h5co+nc3h7hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1234. | c7h13oCqE=>oh+c2h5coch2+c2h5hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1235. | c7h13oCqF=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4p | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1236. | c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h5coc3h6-1 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1237. | c7h13oDqA=>oh+ch2o+nc3h7coc2h4p | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1238. | c7h13oDqB=>oh+ch3hco+c3h7coch2 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1239. | c7h13oDqC=>oh+c2h5hco+nc3h7co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1240. | c7h14o-AB+h=>h2+acrol+pc4h9 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1241. | c7h14o-AB+oh=>h2o+acrol+pc4h9 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1242. | c7h14o-AB+ho2=>h2o2+acrol+pc4h9 | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 1243. | c7h14o-AB+h=>h2+nc5h11coch2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1244. | c7h14o-AB+oh=>h2o+nc5h11coch2 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1245. | c7h14o-AB+ho2=>h2o2+nc5h11coch2 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1246. | c7h14o-BC+h=>h2+mvk+nc3h7 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1247. | c7h14o-BC+oh=>h2o+mvk+nc3h7 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1248. | c7h14o-BC+ho2=>h2o2+mvk+nc3h7 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1249. | c7h14o-BC+h=>h2+ch3chco+pc4h9 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1250. | c7h14o-BC+oh=>h2o+ch3chco+pc4h9 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1251. | c7h14o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+pc4h9 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1252. | c7h14o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+c2h5 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1253. | c7h14o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+c2h5 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1254. | c7h14o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+c2h5 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1255. | c7h14o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc3h7 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1256. | c7h14o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc3h7 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1257. | c7h14o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc3h7 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1258. | c7h14o-AC+h=>h2+hco+c6h12-1 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1259. | c7h14o-AC+oh=>h2o+hco+c6h12-1 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1260. | c7h14o-AC+ho2=>h2o2+hco+c6h12-1 | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 1261. | c7h14o-AC+h=>h2+nc4h9coc2h4p | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1262. | c7h14o-AC+oh=>h2o+nc4h9coc2h4p | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1263. | c7h14o-AC+ho2=>h2o2+nc4h9coc2h4p | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1264. | c7h14o-BD+h=>h2+c5h10+ch3co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1265. | c7h14o-BD+oh=>h2o+c5h10+ch3co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1266. | c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c5h10+ch3co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1267. | c7h14o-BD+h=>h2+c3h6+nc3h7co | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1268. | c7h14o-BD+oh=>h2o+c3h6+nc3h7co | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1269. | c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+nc3h7co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1270. | c7h14o-CE+h=>h2+c4h8+c2h5co | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1271. | c7h14o-CE+oh=>h2o+c4h8+c2h5co | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1272. | c7h14o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5co | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1273. | c7h14o-AD+h=>h2+ch2hco+c5h10 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1274. | c7h14o-AD+oh=>h2o+ch2hco+c5h10 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1275. | c7h14o-AD+ho2=>h2o2+ch2hco+c5h10 | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 1276. | c7h14o-AD+h=>h2+nc3h7coc3h6-1 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1277. | c7h14o-AD+oh=>h2o+nc3h7coc3h6-1 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1278. | c7h14o-AD+ho2=>h2o2+nc3h7coc3h6-1 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1279. | c7h14o-BE+h=>h2+c4h8+ch2coch3 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1280. | c7h14o-BE+oh=>h2o+c4h8+ch2coch3 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1281. | c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c4h8+ch2coch3 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1282. | c7h14o-BE+h=>h2+c3h6+c2h5coch2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1283. | c7h14o-BE+oh=>h2o+c3h6+c2h5coch2 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1284. | c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5coch2 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1285. | c7h14o-AE+h=>h2+ch2ch2hco+c4h8 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1286. | c7h14o-AE+oh=>h2o+ch2ch2hco+c4h8 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1287. | c7h14o-AE+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c4h8 | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 1288. | c7h14o-AE+h=>h2+c2h4+c2h5coc2h4p | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1289. | c7h14o-AE+oh=>h2o+c2h4+c2h5coc2h4p | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1290. | c7h14o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coc2h4p | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1291. | c7h14o-BF+h=>h2+c2h4+c3h6coch3-1 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1292. | c7h14o-BF+oh=>h2o+c2h4+c3h6coch3-1 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1293. | c7h14o-BF+ho2=>h2o2+c2h4+c3h6coch3-1 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1294. | c7h14-1=pc4h9+ac3h5 | 2.50E+16 | 0.0 | 70000.0 |
| 1295. | c2h3+Ac5h11=c7h14-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1296. | c7h14-1=c3h6+c4h8 | 4.00E+12 | 0.0 | 57430.0 |
| 1297. | Cc7h13-1+h=c7h14-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1298. | c7h14-1+oh=>ch3+c5h11hco | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 1299. | c7h14-1+oh=>ch2o+Ac6h13 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 1300. | c7h14-1+o=>ch2co+ch3+h+2c2h4 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 1301. | c7h14-1+ho2=>oh+c7h14o-AB | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 1302. | Ec5h9-1+c2h5=c7h14-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1303. | c7h14-1+ho2=h2o2+Cc7h13-1 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 1304. | c7h14-1+o=oh+Cc7h13-1 | 4.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 1305. | c7h14-1+h=h2+Cc7h13-1 | 6.55E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 1306. | c7h14-1+oh=h2o+Cc7h13-1 | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 1307. | c7h14-1+ch3=ch4+Cc7h13-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1308. | c7h14-1+c2h3=c2h4+Cc7h13-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1309. | c7h14-1+nc3h7=c3h8+Cc7h13-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 1310. | Cc7h13-1=Gc7h13-1 | 8.55E+08 | 1.0 | 24500.0 |
| 1311. | Cc7h13-1=Fc7h13-1 | 3.30E+09 | 1.0 | 27300.0 |
| 1312. | Gc7h13-1=c2h4+Ec5h9-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1313. | Fc7h13-1=c3h6+Dc4h7-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1314. | Cc7h13-1=c4h6+nc3h7 | 1.34E+15 | -0.5 | 38320.0 |
| 1315. | Cc7h13-1+ho2=>pc4h9+acrol+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 8000.0 |
| 1316. | c7h14-2+h=h2+c2h5+c5h8-13 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 1317. | c7h14-2+oh=h2o+c2h5+c5h8-13 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 1318. | c7h14-2+ho2=h2o2+c2h5+c5h8-13 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 |
| 1319. | c7h14-2+ch3=ch4+c2h5+c5h8-13 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 1320. | c7h14-2+ch3o2=ch3o2h+c2h5+c5h8-13 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 1321. | c7h14-2+c2h5=c2h6+c2h5+c5h8-13 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 1322. | c7h14-2+o=oh+c2h5+c5h8-13 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 1323. | c7h14-3+h=h2+c2h5+c5h8-13 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 1324. | c7h14-3+oh=h2o+c2h5+c5h8-13 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 1325. | c7h14-3+ho2=h2o2+c2h5+c5h8-13 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 |
| 1326. | c7h14-3+ch3=ch4+c2h5+c5h8-13 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 1327. | c7h14-3+ch3o2=ch3o2h+c2h5+c5h8-13 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 1328. | c7h14-3+c2h5=c2h6+c2h5+c5h8-13 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 1329. | c7h14-3+o=oh+c2h5+c5h8-13 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 1330. | c7h14-2+oh=>ch3hco+Ac5h11 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 1331. | c7h14-2+oh=>c2h5+nc4h9hco | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 1332. | c7h14-3+oh=>c2h5hco+pc4h9 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 1333. | c7h14-3+oh=>nc3h7+nc3h7hco | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 1334. | c6h13hco+h=h2+c6h13co | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 1335. | c6h13hco+oh=h2o+c6h13co | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 1336. | c6h13hco+ho2=h2o2+c6h13co | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 1337. | c6h13hco+ch3=ch4+c6h13co | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 1338. | c6h13hco+c2h5=c2h6+c6h13co | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 1339. | c6h13co+M=co+Ac6h13+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 1340. | c6h13co+ho2=>co2+oh+Ac6h13 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1341. | c6h11hco=Fc6h11-1+hco | 7.25E+16 | 0.0 | 82400.0 |
| 1342. | c6h11hco+o2=c6h11co+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 1343. | c6h11hco+ho2=c6h11co+h2o2 | 1.70E+12 | 0.0 | 10700.0 |
| 1344. | c6h11hco+oh=c6h11co+h2o | 2.35E+10 | 0.7 | -1113.0 |
| 1345. | c6h11hco+o=c6h11co+oh | 5.85E+12 | 0.0 | 1808.0 |
| 1346. | c6h11hco+h=c6h11co+h2 | 5.54E+02 | 3.5 | 5167.0 |
| 1347. | c6h11hco+ch3=c6h11co+ch4 | 2.25E+00 | 4.0 | 8285.0 |
| 1348. | c6h11hco+c2h5=c6h11co+c2h6 | 1.64E+00 | 3.6 | 9141.0 |
| 1349. | c6h11hco+hco=c6h11co+ch2o | 4.70E+04 | 2.7 | 18235.0 |
| 1350. | c6h11hco+c2h3=c6h11co+c2h4 | 8.50E+09 | 0.0 | 6000.0 |
| 1351. | c6h11co=Fc6h11-1+co | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1352. | mhd=>Cc4h7-1+ac3h5 | 5.00E+15 | 0.0 | 72800.0 |
| 1353. | mhd=>ch3+c6h9 | 5.00E+16 | 0.0 | 73000.0 |
| 1354. | c5h8-12=>c3h3+c2h5 | 2.00E+15 | 0.0 | 75000.0 |
| 1355. | c5h8-12=c5h8-13 | 2.50E+13 | 0.0 | 63000.0 |
| 1356. | Ac7h13-3=c2h4+Ac5h9-1 | 1.00E+11 | 0.0 | 37000.0 |
| 1357. | Ac7h13-3=c7h12-13+h | 4.26E+13 | 0.0 | 38600.0 |
| 1358. | Dc7h13-1=c2h3+c5h10 | 1.00E+11 | 0.0 | 37000.0 |
| 1359. | Dc7h13-1=c7h12-13+h | 4.26E+13 | 0.0 | 38600.0 |
| 1360. | c7h12-16=ac3h5+Dc4h7-1 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 1361. | c7h12-13=c5h7+c2h5 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 1362. | c6h14=nc3h7+nc3h7 | 1.00E+17 | 0.0 | 86930.0 |
| 1363. | c6h14=c2h5+pc4h9 | 1.00E+17 | 0.0 | 84750.0 |
| 1364. | c6h14=ch3+Ac5h11 | 1.00E+17 | 0.0 | 87430.0 |
| 1365. | c6h14=h+Ac6h13 | 1.80E+16 | 0.0 | 98000.0 |
| 1366. | c6h14=h+Bc6h13 | 1.20E+16 | 0.0 | 98730.0 |
| 1367. | c6h14=h+Cc6h13 | 1.20E+16 | 0.0 | 98530.0 |
| 1368. | c6h14+o2=ho2+Ac6h13 | 4.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 1369. | c6h14+o2=ho2+Bc6h13 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 1370. | c6h14+o2=ho2+Cc6h13 | 8.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 1371. | c6h14+oh=h2o+Ac6h13 | 1.41E+07 | 1.8 | 973.7 |
| 1372. | c6h14+oh=h2o+Bc6h13 | 1.99E+06 | 2.0 | -596.2 |
| 1373. | c6h14+oh=h2o+Cc6h13 | 2.25E+06 | 2.0 | -1391.0 |
| 1374. | c6h14+ho2=h2o2+Ac6h13 | 3.60E+04 | 2.5 | 16683.0 |
| 1375. | c6h14+ho2=h2o2+Bc6h13 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 1376. | c6h14+ho2=h2o2+Cc6h13 | 4.00E+04 | 2.5 | 14208.0 |
| 1377. | c6h14+h=h2+Ac6h13 | 5.70E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 1378. | c6h14+h=h2+Bc6h13 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1379. | c6h14+h=h2+Cc6h13 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1380. | o+c6h14=oh+Ac6h13 | 1.00E+14 | 0.0 | 7850.0 |
| 1381. | o+c6h14=oh+Bc6h13 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1382. | o+c6h14=oh+Cc6h13 | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1383. | c6h14+ch3=ch4+Ac6h13 | 6.00E-01 | 4.0 | 8200.0 |
| 1384. | c6h14+ch3=ch4+Bc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1385. | c6h14+ch3=ch4+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1386. | c6h14+c2h5=c2h6+Ac6h13 | 6.00E+11 | 0.0 | 13500.0 |
| 1387. | c6h14+c2h5=c2h6+Bc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1388. | c6h14+c2h5=c2h6+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1389. | c6h14+hco=ch2o+Ac6h13 | 2.00E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 1390. | c6h14+hco=ch2o+Bc6h13 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 1391. | c6h14+hco=ch2o+Cc6h13 | 2.20E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 1392. | c6h14+ch3o=ch3oh+Ac6h13 | 3.20E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 1393. | c6h14+ch3o=ch3oh+Bc6h13 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 1394. | c6h14+ch3o=ch3oh+Cc6h13 | 2.90E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 1395. | c6h14+ch2oh=ch3oh+Ac6h13 | 2.00E+02 | 3.0 | 14000.0 |
| 1396. | c6h14+ch2oh=ch3oh+Bc6h13 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |
| 1397. | c6h14+ch2oh=ch3oh+Cc6h13 | 1.20E+02 | 3.0 | 12000.0 |
| 1398. | c6h14+ch3o2=ch3o2h+Ac6h13 | 1.20E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 1399. | c6h14+ch3o2=ch3o2h+Bc6h13 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1400. | c6h14+ch3o2=ch3o2h+Cc6h13 | 6.00E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1401. | c6h14+ch2hco=ch3hco+Ac6h13 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1402. | c6h14+ch2hco=ch3hco+Bc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1403. | c6h14+ch2hco=ch3hco+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1404. | c6h14+ch3co=ch3hco+Ac6h13 | 3.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 1405. | c6h14+ch3co=ch3hco+Bc6h13 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 1406. | c6h14+ch3co=ch3hco+Cc6h13 | 2.00E+11 | 0.0 | 12700.0 |
| 1407. | c6h14+nc3h7=c3h8+Ac6h13 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1408. | c6h14+nc3h7=c3h8+Bc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1409. | c6h14+nc3h7=c3h8+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1410. | c6h14+pc4h9=c4h10+Ac6h13 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1411. | c6h14+pc4h9=c4h10+Bc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1412. | c6h14+pc4h9=c4h10+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1413. | c6h14+Ac5h11=c5h12+Ac6h13 | 6.00E+11 | 0.0 | 13700.0 |
| 1414. | c6h14+Ac5h11=c5h12+Bc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1415. | c6h14+Ac5h11=c5h12+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1416. | c6h14+Ac6h13=c6h14+Bc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1417. | c6h14+Ac6h13=c6h14+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 1418. | c6h14+Bc6h13=c6h14+Cc6h13 | 4.00E+11 | 0.0 | 12400.0 |
| 1419. | Ac6h13=pc4h9+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1420. | Bc6h13=nc3h7+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1421. | Cc6h13=c2h5+c4h8 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1422. | Cc6h13=ch3+c5h10 | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 1423. | Ac6h13=h+c6h12-1 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1424. | Bc6h13=h+c6h12-2 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1425. | Bc6h13=h+c6h12-1 | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 1426. Cc6h13=h+c6h12-2 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1427. Cc6h13=h+c6h12-3 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1428. Ac6h13+o2=c6h12-1+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1429. Bc6h13+o2=c6h12-1+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1430. Bc6h13+o2=c6h12-2+ho2 | 8.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1431. Cc6h13+o2=c6h12-2+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1432. Cc6h13+o2=c6h12-3+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1433. Ac6h13=Bc6h13 | 9.89E+07 | 1.0 | 12000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.48E+08 | 1.0 | 14500.0 |
| 1434. Ac6h13=Cc6h13 | 3.35E+09 | 1.0 | 37000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.02E+08 | 1.0 | 39500.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 1435. Ac6h13=Cc6h13 | 5.75E+08 | 1.0 | 17300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.62E+08 | 1.0 | 19800.0 |
| Declared duplicate reaction... | | | |
| 1436. Bc6h13=Cc6h13 | 3.35E+09 | 1.0 | 37000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.35E+09 | 1.0 | 37000.0 |
| 1437. Ac6h13+o2=c6h13qjA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1438. Bc6h13+o2=c6h13qjB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1439. Cc6h13+o2=c6h13qjC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1440. Ac6h13+ho2=c6h13ojA+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1441. Bc6h13+ho2=c6h13ojB+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1442. Cc6h13+ho2=c6h13ojC+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1443. Ac6h13+ch3o2=c6h13ojA+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1444. Bc6h13+ch3o2=c6h13ojB+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1445. Cc6h13+ch3o2=c6h13ojC+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1446. Ac6h13+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1447. Bc6h13+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1448. Cc6h13+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1449. Ac6h13+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1450. Bc6h13+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1451. Cc6h13+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1452. Ac6h13+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1453. Ac6h13+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1454. Ac6h13+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1455. Bc6h13+c6h13qjA=c6h13ojB+c6h13ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1456. Bc6h13+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1457. Bc6h13+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1458. Cc6h13+c6h13qjA=c6h13ojC+c6h13ojA | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1459. Cc6h13+c6h13qjB=c6h13ojC+c6h13ojB | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1460. Cc6h13+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 1461. c6h13qjA=c6h12rBqA | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1462. c6h13qjA=c6h12rCqA | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1463. c6h13qjA=c6h12rDqA | 9.90E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 1464. c6h13qjA=c6h12rEqA | 1.70E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 1465. c6h13qjB=c6h12rAqB | 5.00E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 1466. c6h13qjB=c6h12rCqB | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1467. c6h13qjB=c6h12rDqB | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1468. c6h13qjB=c6h12rEqB | 9.90E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 1469. c6h13qjB=c6h12rFqB | 2.50E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 1470. c6h13qjC=c6h12rBqC | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1471. c6h13qjC=c6h12rAqC | 8.60E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 1472. c6h13qjC=c6h12rDqC | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1473. c6h13qjC=c6h12rEqC | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1474. c6h13qjC=c6h12rFqC | 1.50E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1475. c6h13qjA+ho2=c6h13qA+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1476. c6h13qjB+ho2=c6h13qB+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1477. c6h13qjC+ho2=c6h13qC+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1478. c6h13qjA+ho2=c6h13ojA+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1479. c6h13qjB+ho2=c6h13ojB+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1480. c6h13qjC+ho2=c6h13ojC+oh+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1481. c6h13qjA+ch3o2=c6h13ojA+ch3o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1482. c6h13qjB+ch3o2=c6h13ojB+ch3o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1483. c6h13qjC+ch3o2=c6h13ojC+ch3o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1484. c6h13qjA+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1485. c6h13qjB+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1486. c6h13qjC+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1487. c6h13qjA+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1488. c6h13qjB+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1489. c6h13qjC+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1490. c6h13qjA+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1491. c6h13qjA+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1492. c6h13qjA+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1493. c6h13qjB+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1494. c6h13qjB+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1495. c6h13qjC+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC+o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1496. c6h12rDqA=c4h8+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1497. c6h12rEqA=c3h6+c3h6ooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1498. c6h12rEqB=c3h6+c3h6ooh2-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1499. c6h12rFqB=c2h4+c4h8rDqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1500. c6h12rFqC=c2h4+c4h8rAqB | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1501. c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1502. c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1503. c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1504. c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1505. c6h12rAqB+o2=c6h12qjAqB | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1506. c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1507. c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1508. c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1509. c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1510. c6h12rAqC+o2=c6h12qjAqC | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1511. c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1512. c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1513. c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 1514. c6h12rFqC+o2=c6h12qjFqC | 4.82E+36 | -8.2 | 5167.0 |
| 1515. c6h12rAqC=>oh+c2h4+nc3h7hco | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1516. c6h12rCqA=>oh+ch2o+c5h10 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1517. c6h12rDqB=>oh+ch3hco+c4h8 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1518. c6h12rEqC=>oh+c3h6+c2h5hco | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1519. c6h12rBqA=oh+c6h12o#3 | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1520. c6h12rCqA=oh+c6h12o#4 | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1521. c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1522. c6h12rEqA=oh+c6h12o#6 | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 1523. c6h12rAqB=oh+c6h12o#3 | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1524. c6h12rCqB=oh+c6h12o#3 | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1525. c6h12rDqB=oh+c6h12o#4 | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1526. c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1527. c6h12rFqB=oh+c6h12o#6 | 1.50E+08 | 0.0 | 1800.0 |
| 1528. c6h12rBqC=oh+c6h12o#3 | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1529. c6h12rAqC=oh+c6h12o#4 | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1530. c6h12rDqC=oh+c6h12o#3 | 2.95E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 1531. c6h12rEqC=oh+c6h12o#4 | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 1532. c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1533. c6h12rBqA=ho2+c6h12-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1534. c6h12rAqB=ho2+c6h12-1 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1535. c6h12rBqC=ho2+c6h12-2 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1536. c6h12rCqB=ho2+c6h12-2 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1537. c6h12rDqC=ho2+c6h12-3 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1538. c6h12qjBqA=oh+c6h11oAqB | 2.68E+12 | 0.0 | 30500.0 |
| 1539. c6h12qjCqA=oh+c6h11oAqC | 4.60E+11 | 0.0 | 23000.0 |
| 1540. c6h12qjDqA=oh+c6h11oAqD | 7.90E+10 | 0.0 | 20000.0 |
| 1541. c6h12qjEqA=oh+c6h11oAqE | 1.36E+10 | 0.0 | 19000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1542. | c6h12qjAqB=oh+c6h11oBqA | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 1543. | c6h12qjCqB=oh+c6h11oBqC | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 1544. | c6h12qjDqB=oh+c6h11oBqD | 2.30E+11 | 0.0 | 20000.0 |
| 1545. | c6h12qjEqB=oh+c6h11oBqE | 3.95E+10 | 0.0 | 17000.0 |
| 1546. | c6h12qjFqB=oh+c6h11oBqF | 6.79E+09 | 0.0 | 16000.0 |
| 1547. | c6h12qjAqC=oh+c6h11oCqA | 2.30E+11 | 0.0 | 20000.0 |
| 1548. | c6h12qjBqC=oh+c6h11oCqB | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 1549. | c6h12qjDqC=oh+c6h11oCqD | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 1550. | c6h12qjEqC=oh+c6h11oCqE | 2.30E+11 | 0.0 | 20000.0 |
| 1551. | c6h12qjFqC=oh+c6h11oCqF | 3.95E+10 | 0.0 | 17000.0 |
| 1552. | c6h13qA=oh+c6h13ojA | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 1553. | c6h13qB=oh+c6h13ojB | 1.25E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 1554. | c6h13qC=oh+c6h13ojC | 1.25E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 1555. | c6h13ojA=ch2o+Ac5h11 | 1.00E+15 | 0.0 | 21600.0 |
| 1556. | c6h13ojB=ch3hco+pc4h9 | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 1557. | c6h13ojB=ch3+nc4h9hco | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 1558. | c6h13ojC=c2h5hco+nc3h7 | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 1559. | c6h13ojC=c2h5+nc3h7hco | 7.94E+14 | 0.0 | 15300.0 |
| 1560. | c6h11oAqB=>oh+hco+nc4h9hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1561. | c6h11oAqC=>oh+ch2hco+nc3h7hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1562. | c6h11oAqD=>oh+c2h5hco+ch2ch2hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1563. | c6h11oAqE=>oh+ch3hco+c3h6hco-1 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1564. | c6h11oBqA=>oh+ch2o+nc4h9co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1565. | c6h11oBqC=>oh+ch3co+nc3h7hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1566. | c6h11oBqD=>oh+c2h5hco+ch2coch3 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1567. | c6h11oBqE=>oh+ch3hco+ch3coc2h4p | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1568. | c6h11oBqF=>oh+ch2o+c3h6coch3-1 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1569. | c6h11oCqA=>oh+ch2o+c3h7coch2 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1570. | c6h11oCqB=>oh+ch3hco+nc3h7co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1571. | c6h11oCqD=>oh+c2h5hco+c2h5co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1572. | c6h11oCqE=>oh+ch3hco+c2h5coch2 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1573. | c6h11oCqF=>oh+ch2o+c2h5coc2h4p | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1574. | c6h12o#3+h=>h2+ch2co+c2h5+c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1575. | c6h12o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5+c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1576. | c6h12o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1577. | c6h12o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1578. | c6h12o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1579. | c6h12o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1580. | c6h12o#3+o=>oh+ch2hco+2c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1581. | c6h12o#4+h=>h2+ch2hco+2c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1582. | c6h12o#4+oh=>h2o+c2h5co+c3h6 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1583. | c6h12o#4+oh=>h2o+ch3co+c4h8 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1584. | c6h12o#4+ho2=>h2o2+ch2hco+2c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1585. | c6h12o#4+ch3=>ch4+ch2hco+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1586. | c6h12o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+2c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1587. | c6h12o#4+c2h5=>c2h6+ch2hco+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1588. | c6h12o#4+o=>oh+ch2hco+2c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1589. | c6h12o#6+h=>h2+ch2hco+2c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1590. | c6h12o#6+oh=>h2o+ch3coc2h4p+c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1591. | c6h12o#6+oh=>h2o+ch2ch2hco+c3h6 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1592. | c6h12o#6+ho2=>h2o2+ch2hco+2c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1593. | c6h12o#6+ch3=>ch4+ch2hco+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1594. | c6h12o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+2c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1595. | c6h12o#6+c2h5=>c2h6+ch2hco+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1596. | c6h12o#6+o=>oh+ch2hco+2c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1597. | c6h12o-AD+h=>h2+c4h8+ch2hco | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1598. | c6h12o-AD+oh=>h2o+c4h8+ch2hco | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1599. | c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c4h8+ch2hco | 2.50E+04 | 2.5 | 11605.0 |
| 1600. | c6h12o-AD+h=>h2+c2h4+c2h5coch2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1601. | c6h12o-AD+oh=>h2o+c2h4+c2h5coch2 | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1602. | c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coch2 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1603. | c6h12o-BE+h=>h2+c3h6+ch2coch3 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1604. | c6h12o-BE+oh=>h2o+c3h6+ch2coch3 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1605. | c6h12o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2coch3 | 1.00E+04 | 2.5 | 9400.0 |
| 1606. | c6h12-1=nc3h7+ac3h5 | 2.50E+16 | 0.0 | 70000.0 |
| 1607. | c2h3+pc4h9=c6h12-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1608. | c6h12-1=c3h6+c3h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 57430.0 |
| 1609. | Cc6h11-1+h=c6h12-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1610. | c6h12-1+oh=Ac5h11+ch2o | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| 1611. | c6h12-1+o=>ch2hco+pc4h9 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 1612. | c6h12-1+o=Ac5h11+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 1613. | c6h12-1+ho2=h2o2+Cc6h11-1 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 1614. | c6h12-1+o=oh+Cc6h11-1 | 4.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 1615. | c6h12-1+h=h2+Cc6h11-1 | 6.55E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 1616. | c6h12-1+oh=h2o+Cc6h11-1 | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 1617. | c6h12-1+ch3=ch4+Cc6h11-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1618. | c6h12-1+c2h3=c2h4+Cc6h11-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1619. | c6h12-1+nc3h7=c3h8+Cc6h11-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 1620. | Dc4h7-1+c2h5=c6h12-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1621. | Ec5h9-1+ch3=c6h12-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1622. | c6h12-1+oh=h2o+ch3+c5h8-14 | 1.99E+06 | 2.0 | -600.0 |
| 1623. | c6h12-1+ho2=h2o2+ch3+c5h8-14 | 8.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| 1624. | c6h12-1+ch3=ch4+ch3+c5h8-14 | 8.00E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 1625. | c6h12-1+h=h2+ch3+c5h8-14 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1626. | c6h12-1+o=oh+ch3+c5h8-14 | 1.13E+03 | 3.3 | 1650.0 |
| 1627. | c6h12-1+oh=h2o+ac3h5+c3h6 | 1.99E+06 | 2.0 | -600.0 |
| 1628. | c6h12-1+ho2=h2o2+ac3h5+c3h6 | 8.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| 1629. | c6h12-1+ch3=ch4+ac3h5+c3h6 | 8.00E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 1630. | c6h12-1+h=h2+ac3h5+c3h6 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1631. | c6h12-1+o=oh+ac3h5+c3h6 | 1.13E+03 | 3.3 | 1650.0 |
| 1632. | c6h12-1+oh=h2o+Fc6h11-1 | 1.41E+07 | 1.8 | 974.0 |
| 1633. | c6h12-1+ho2=h2o2+Fc6h11-1 | 1.20E+13 | 0.0 | 19400.0 |
| 1634. | c6h12-1+ch3=ch4+Fc6h11-1 | 1.30E+12 | 0.0 | 11600.0 |
| 1635. | c6h12-1+h=h2+Fc6h11-1 | 5.70E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 1636. | c6h12-1+o=oh+Fc6h11-1 | 4.36E+06 | 2.4 | 5500.0 |
| 1637. | c6h12-2+o2=Cc6h11-1+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 39000.0 |
| 1638. | c6h12-2+ho2=Cc6h11-1+h2o2 | 1.50E+11 | 0.0 | 14190.0 |
| 1639. | c6h12-2+oh=Cc6h11-1+h2o | 7.70E+05 | 2.2 | 622.0 |
| 1640. | c6h12-2+o=Cc6h11-1+oh | 1.75E+11 | 0.7 | 5884.0 |
| 1641. | c6h12-2+h=Cc6h11-1+h2 | 6.46E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 1642. | c6h12-2+ch3=Cc6h11-1+ch4 | 1.60E+11 | 0.0 | 8800.0 |
| 1643. | c6h12-2+c2h5=Cc6h11-1+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 9800.0 |
| 1644. | c6h12-2+c2h3=Cc6h11-1+c2h4 | 2.21E+00 | 3.5 | 4682.0 |
| 1645. | c6h12-2+ho2=h2o2+Bc6h11-3 | 1.00E+11 | 0.0 | 17060.0 |
| 1646. | c6h12-2+o=oh+Bc6h11-3 | 4.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 1647. | c6h12-2+h=h2+Bc6h11-3 | 6.55E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 1648. | c6h12-2+oh=h2o+Bc6h11-3 | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 1649. | c6h12-2+ch3=ch4+Bc6h11-3 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1650. | c6h12-2+c2h3=c2h4+Bc6h11-3 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1651. | c6h12-2+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3 | 2.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 1652. | c6h12-3+ho2=h2o2+Bc6h11-3 | 2.00E+11 | 0.0 | 17060.0 |
| 1653. | c6h12-3+o=oh+Bc6h11-3 | 8.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 1654. | c6h12-3+h=h2+Bc6h11-3 | 1.31E+13 | 0.0 | 4445.0 |
| 1655. | c6h12-3+oh=h2o+Bc6h11-3 | 8.37E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 1656. | c6h12-3+ch3=ch4+Bc6h11-3 | 4.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1657. | c6h12-3+c2h3=c2h4+Bc6h11-3 | 4.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 1658. | c6h12-3+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3 | 4.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 1659. | Fc6h11-1=Cc6h11-1 | 1.00E+12 | 0.0 | 29880.0 |
| 1660. | Cc6h11-1=c2h5+c4h6 | 4.00E+10 | 0.0 | 38250.0 |
| 1661. | Cc6h11-1=c5h8-13+ch3 | 1.00E+12 | 0.0 | 50000.0 |
| 1662. | Cc6h11-1+ho2=>nc3h7+acrol+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 8000.0 |
| 1663. | Fc6h11-1=c2h4+Dc4h7-1 | 1.00E+12 | 0.0 | 35000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1664. | Bc6h11-3=c5h8-13+ch3 | 2.00E+13 | 0.0 | 42320.0 |
| 1665. | ac3h5+ac3h5=c6h10-15 | 1.02E+13 | 0.0 | -263.0 |
| 1666. | Cc4h7-1+c2h3=c6h10-15 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1667. | c6h10-15+o2=c6h9+ho2 | 1.00E+11 | 0.0 | 25050.0 |
| 1668. | c6h10-15+ho2=c6h9+h2o2 | 1.64E+11 | 0.0 | 12583.0 |
| 1669. | c6h10-15+oh=c6h9+h2o | 5.60E+12 | 0.0 | 861.0 |
| 1670. | c6h10-15+h=c6h9+h2 | 1.00E+14 | 0.0 | 3900.0 |
| 1671. | c6h10-15+ch3=c6h9+ch4 | 2.50E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 1672. | c6h10-15+c2h5=c6h9+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 1673. | c6h10-15+c2h3=c6h9+c2h4 | 6.30E+12 | 0.0 | 13000.0 |
| 1674. | c6h10-15+ac3h5=c6h9+c3h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 10500.0 |
| 1675. | c6h10-13=c2h2+c4h8 | 1.00E+14 | 0.0 | 75000.0 |
| 1676. | c5h11hco+h=h2+c5h11co | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 1677. | c5h11hco+oh=h2o+c5h11co | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 1678. | c5h11hco+ho2=h2o2+c5h11co | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 1679. | c5h11hco+ch3=ch4+c5h11co | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 1680. | c5h11hco+c2h5=c2h6+c5h11co | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 1681. | c5h11co+M=co+Ac5h11+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 1682. | c5h11co+ho2=>co2+oh+Ac5h11 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1683. | c6h7C=Lc6h7 | 2.50E+14 | 0.7 | 41800.0 |
| 1684. | Lc6h7=c2h2+nc4h5 | 3.16E+13 | 0.0 | 43100.0 |
| 1685. | Lc6h7=Lc6h6+h | 3.98E+12 | 0.0 | 36500.0 |
| 1686. | Lc6h7+oh=Lc6h6+h2o | 2.00E+07 | 2.0 | 1000.0 |
| 1687. | Lc6h7+h=Lc6h6+h2 | 2.00E+07 | 2.0 | 1000.0 |
| 1688. | Lc6h7+o2=chocho+nc4h5 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1689. | Lc6h7+o2=Lc6h6+ho2 | 1.00E+07 | 2.0 | 10000.0 |
| 1690. | Lc6h6+o2=>acrol+hco+c2h | 2.00E+08 | 1.5 | 30200.0 |
| 1691. | Lc6h4+o2=>2hco+2c2h | 2.00E+08 | 1.5 | 30200.0 |
| 1692. | c6h5=Uc6h5 | 3.00E+13 | 0.0 | 72896.7 |
| 1693. | Uc6h5=c2h2+nc4h3 | 3.16E+13 | 0.0 | 43100.0 |
| 1694. | Uc6h5=Lc6h4+h | 3.98E+12 | 0.0 | 36500.0 |
| 1695. | c2h5+nc3h7=c5h12 | 5.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1696. | c5h12+h=>h2+ch3+2c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1697. | c5h12+oh=>h2o+ch3+2c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1698. | c5h12+ho2=>h2o2+ch3+2c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1699. | c5h12+ch3=>ch4+ch3+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1700. | c5h12+ch3o2=>ch3o2h+ch3+2c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1701. | c5h12+c2h5=>c2h6+ch3+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1702. | c5h12+o=>oh+ch3+2c2h4 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 1703. | Ac5h11=nc3h7+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1704. | Bc5h11=c2h5+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1705. | Cc5h11=ch3+c4h8 | 4.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 1706. | Ac5h11=h+c5h10 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1707. | Bc5h11=h+c5h10 | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| 1708. | Bc5h11=h+c2c5h10 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1709. | Bc5h11=h+t2c5h10 | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1710. | Cc5h11=h+c2c5h10 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1711. | Cc5h11=h+t2c5h10 | 6.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 1712. | Ac5h11+o2=c5h10+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1713. | Bc5h11+o2=c2c5h10+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1714. | Bc5h11+o2=t2c5h10+ho2 | 1.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1715. | Bc5h11+o2=c5h10+ho2 | 8.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1716. | Cc5h11+o2=c2c5h10+ho2 | 3.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1717. | Cc5h11+o2=t2c5h10+ho2 | 3.90E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1718. | Ac5h11=Bc5h11 | 9.84E+10 | 0.0 | 19660.0 |
| 1719. | Ac5h11+o2=c5h11qjA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1720. | Bc5h11+o2=c5h11qjB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1721. | Cc5h11+o2=c5h11qjC | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1722. | Ac5h11+ho2=>ch2o+pc4h9+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1723. | Ac5h11+o=ch2o+pc4h9 | 1.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1724. | Ac5h11+o2=ch2o+oh+c4h8 | 2.10E+11 | 0.0 | 6158.0 |
| 1725. | Bc5h11+ho2=>ch3hco+oh+nc3h7 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1726. | Bc5h11+o=ch3hco+nc3h7 | 1.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1727. | Bc5h11+o2=>oh+ch3hco+c3h6 | 2.10E+11 | 0.0 | 6158.0 |
| 1728. | Cc5h11+ho2=>oh+c2h5hco+c2h5 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1729. | Cc5h11+o=c2h5hco+c2h5 | 1.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1730. | Cc5h11+o2=>oh+c2h5hco+c2h4 | 2.10E+11 | 0.0 | 6158.0 |
| 1731. | c5h11qjA=c5h10rBqA | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1732. | c5h11qjA=c5h10rCqA | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1733. | c5h11qjA=c5h10rDqA | 9.90E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 1734. | c5h11qjA=c5h10rEqA | 2.50E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 1735. | c5h11qjB=c5h10rAqB | 5.00E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 1736. | c5h11qjB=c5h10rCqB | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1737. | c5h11qjB=c5h10rDqB | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1738. | c5h11qjB=c5h10rEqB | 1.50E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 1739. | c5h11qjC=c5h10rAqC | 1.70E+09 | 1.0 | 28000.0 |
| 1740. | c5h11qjC=c5h10rBqC | 6.70E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 1741. | c5h11qjA+ho2=nc5h11o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1742. | c5h11qjB+ho2=nc5h11o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1743. | c5h11qjC+ho2=nc5h11o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 1744. | c5h10rDqA=c3h6+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1745. | c5h10rEqA=c2h4+c3h6ooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1746. | c5h10rEqB=c2h4+c3h6ooh2-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1747. | c5h10rBqA=c5h10rEqA | 8.60E+08 | 1.0 | 19800.0 |
| 1748. | c5h10rDqA=c5h10rAqA | 5.70E+08 | 1.0 | 15300.0 |
| 1749. | c5h10rEqA=c5h10rAqA | 9.90E+07 | 1.0 | 10000.0 |
| 1750. | c5h10rAqB=c5h10rDqB | 5.70E+08 | 1.0 | 17300.0 |
| 1751. | c5h10rAqB=c5h10rEqB | 1.50E+08 | 1.0 | 14500.0 |
| 1752. | c5h10rEqB=c5h10rBqB | 2.90E+08 | 1.0 | 13300.0 |
| 1753. | c5h10rAqC=c5h10rBqC | 5.70E+08 | 1.0 | 17300.0 |
| 1754. | c5h10rAqA+o2=c5h10qjAqA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1755. | c5h10rBqA+o2=c5h10qjBqA | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1756. | c5h10rCqA+o2=c5h10qjCqA | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1757. | c5h10rDqA+o2=c5h10qjDqA | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1758. | c5h10rEqA+o2=c5h10qjEqA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1759. | c5h10rAqB+o2=c5h10qjAqB | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1760. | c5h10rBqB+o2=c5h10qjBqB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1761. | c5h10rCqB+o2=c5h10qjCqB | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1762. | c5h10rDqB+o2=c5h10qjDqB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1763. | c5h10rEqB+o2=c5h10qjEqB | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1764. | c5h10rAqC+o2=c5h10qjAqC | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1765. | c5h10rBqC+o2=c5h10qjBqC | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 1766. | c5h10rCqA=>oh+ch2o+c4h8 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1767. | c5h10rAqC=>oh+c2h5hco+c2h4 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1768. | c5h10rDqB=>oh+ch3hco+c3h6 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 1769. | c5h10rAqA=oh+nc4h9hco | 1.00E+09 | 0.0 | 7500.0 |
| 1770. | c5h10rBqB=oh+c3h7coch3 | 1.00E+09 | 0.0 | 7500.0 |
| 1771. | c5h10rBqA=oh+c5h10o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 1772. | c5h10rCqA=oh+c5h10o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 1773. | c5h10rDqA=oh+c5h10o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1774. | c5h10rEqA=oh+c5h10o#6 | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 1775. | c5h10rAqB=oh+c5h10o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 1776. | c5h10rCqB=oh+c5h10o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 1777. | c5h10rDqB=oh+c5h10o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 1778. | c5h10rEqB=oh+c5h10o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 1779. | c5h10rAqC=oh+c5h10o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 1780. | c5h10rBqC=oh+c5h10o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 1781. | c5h10rAqB=ho2+c5h10 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1782. | c5h10rBqA=ho2+c5h10 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1783. | c5h10rBqC=ho2+c2c5h10 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1784. | c5h10rBqC=ho2+t2c5h10 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1785. | c5h10rCqB=ho2+c2c5h10 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1786. | c5h10rCqB=ho2+t2c5h10 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 1787. | c5h10qjAqA=oh+c5h9oAqA | 7.79E+12 | 0.0 | 35000.0 |
| 1788. | c5h10qjBqA=oh+c5h9oAqB | 2.68E+12 | 0.0 | 30500.0 |
| 1789. | c5h10qjCqA=oh+c5h9oAqC | 4.60E+11 | 0.0 | 23000.0 |
| 1790. | c5h10qjDqA=oh+c5h9oAqD | 7.90E+10 | 0.0 | 20000.0 |
| 1791. | c5h10qjEqA=oh+c5h9oAqE | 1.36E+10 | 0.0 | 19000.0 |
| 1792. | c5h10qjAqB=oh+c5h9oBqA | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 1793. | c5h10qjCqB=oh+c5h9oBqC | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 1794. | c5h10qjDqB=oh+c5h9oBqD | 2.30E+11 | 0.0 | 20000.0 |
| 1795. | c5h10qjEqB=oh+c5h9oBqE | 3.95E+10 | 0.0 | 17000.0 |
| 1796. | c5h10qjAqC=oh+c5h9oCqA | 2.30E+11 | 0.0 | 20000.0 |
| 1797. | c5h10qjBqC=oh+c5h9oCqB | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 1798. | nc5h11o2h=>oh+ch2o+pc4h9 | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 1799. | c5h9oAqA=>oh+co2+pc4h9 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1800. | c5h9oAqB=>oh+hco+nc3h7hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1801. | c5h9oAqC=>oh+ch2hco+c2h5hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1802. | c5h9oAqD=>oh+ch3hco+ch2ch2hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1803. | c5h9oAqE=>oh+ch2o+c3h6hco-1 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1804. | c5h9oBqA=>oh+ch2o+nc3h7co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1805. | c5h9oBqC=>oh+ch3co+c2h5hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1806. | c5h9oBqD=>oh+ch3hco+ch2coch3 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1807. | c5h9oBqE=>oh+ch3coc2h4p+ch2o | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1808. | c5h9oCqA=>oh+c2h5coch2+ch2o | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1809. | c5h9oCqB=>oh+c2h5co+ch3hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 1810. | c5h10o#3+h=>h2+ch2co+ch3+c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1811. | c5h10o#3+oh=>h2o+ch2co+ch3+c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1812. | c5h10o#3+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1813. | c5h10o#3+ch3=>ch4+ch2co+ch3+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1814. | c5h10o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1815. | c5h10o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1816. | c5h10o#3+o=>oh+hco+2c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1817. | c5h10o#4+h=>h2+hco+2c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1818. | c5h10o#4+oh=>h2o+c2h5coc2h4p | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1819. | c5h10o#4+oh=>h2o+ac3h5hco+ch3 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1820. | c5h10o#4+oh=>h2o+hco+c4h8 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1821. | c5h10o#4+ho2=>h2o2+hco+2c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1822. | c5h10o#4+ch3=>ch4+hco+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1823. | c5h10o#4+ch3o2=>ch3o2h+hco+2c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1824. | c5h10o#4+c2h5=>c2h6+hco+2c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1825. | c5h10o#4+o=>oh+hco+2c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1826. | c5h10o#6+h=>h2+ch2ch2hco+c2h4 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1827. | c5h10o#6+oh=>h2o+ch2ch2hco+c2h4 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1828. | c5h10o#6+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c2h4 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1829. | c5h10o#6+ch3=>ch4+ch2ch2hco+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1830. | c5h10o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2ch2hco+c2h4 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1831. | c5h10o#6+c2h5=>c2h6+ch2ch2hco+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1832. | c5h10o#6+o=>oh+ch2ch2hco+c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1833. | c5h10o#5+h=h2+c4h8hco-2 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1834. | c5h10o#5+oh=h2o+c4h8hco-2 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1835. | c5h10o#5+ho2=h2o2+c4h8hco-2 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 1836. | c5h10o#5+ch3=ch4+c4h8hco-2 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1837. | c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+c4h8hco-2 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1838. | c5h10o#5+c2h5=c2h6+c4h8hco-2 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1839. | c5h10o#5+o=oh+c4h8hco-2 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1840. | c5h10o#5+h=h2+c3h6coch3-1 | 1.35E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1841. | c5h10o#5+oh=h2o+c3h6coch3-1 | 3.90E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 1842. | c5h10o#5+ho2=h2o2+c3h6coch3-1 | 6.00E+11 | 0.0 | 15500.0 |
| 1843. | c5h10o#5+ch3=ch4+c3h6coch3-1 | 3.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 1844. | c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+c3h6coch3-1 | 2.25E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 1845. | c5h10o#5+c2h5=c2h6+c3h6coch3-1 | 3.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 1846. | c5h10o#5+o=oh+c3h6coch3-1 | 3.90E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 1847. | Ac5h9o#5=c3h6+ch2hco | 5.00E+13 | 0.0 | 28800.0 |
| 1848. | c5h10=ac3h5+c2h5 | 2.50E+16 | 0.0 | 70000.0 |
| 1849. | c5h10+ch3=nc3h7+c3h6 | 9.60E+10 | 0.0 | 8000.0 |
| 1850. | c2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8 | 1.70E+11 | 0.0 | 7400.0 |
| 1851. | t2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8 | 1.70E+11 | 0.0 | 7400.0 |
| 1852. | c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| 1853. | c2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1854. | t2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1855. | c2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1856. | t2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1857. | c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 1858. | c2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 1859. | t2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4 | 3.40E+07 | 1.8 | 550.0 |
| 1860. | c5h10+ho2=>oh+c5h10o#3 | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 1861. | c2c5h10+ho2=>oh+c5h10o#3 | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 1862. | t2c5h10+ho2=>oh+c5h10o#3 | 1.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 1863. | c5h10+h=h2+Cc5h9-1 | 1.70E+05 | 2.5 | 2490.0 |
| 1864. | c5h10+oh=h2o+Cc5h9-1 | 3.10E+06 | 2.0 | -300.0 |
| 1865. | c5h10+ho2=Cc5h9-1+h2o2 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 1866. | c5h10+ch3=ch4+Cc5h9-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 1867. | c5h10+ch3o2=ch3o2h+Cc5h9-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| 1868. | c5h10+c2h5=c2h6+Cc5h9-1 | 2.20E+00 | 3.5 | 6835.0 |
| 1869. | c5h10+o=oh+Cc5h9-1 | 6.00E+10 | 0.7 | 7682.0 |
| 1870. | c5h10+h=Dc5h9-1+h2 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 1871. | c5h10+oh=Dc5h9-1+h2o | 1.99E+06 | 2.0 | -600.0 |
| 1872. | c5h10+ho2=Dc5h9-1+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| 1873. | c5h10+o=Dc5h9-1+oh | 1.13E+03 | 3.3 | 1650.0 |
| 1874. | c5h10+ch3=Dc5h9-1+ch4 | 8.00E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 1875. | c5h10+h=Ec5h9-1+h2 | 5.70E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 1876. | c5h10+oh=Ec5h9-1+h2o | 1.41E+07 | 1.8 | 974.0 |
| 1877. | c5h10+ho2=Ec5h9-1+h2o2 | 1.20E+13 | 0.0 | 19400.0 |
| 1878. | c5h10+o=Ec5h9-1+oh | 4.36E+06 | 2.4 | 5500.0 |
| 1879. | c5h10+ch3=Ec5h9-1+ch4 | 1.30E+12 | 0.0 | 11600.0 |
| 1880. | sc3h5+c2h5=c2c5h10 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1881. | sc3h5+c2h5=t2c5h10 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1882. | Dc5h9-1=c5h8-13+h | 1.20E+13 | 0.0 | 27600.0 |
| 1883. | Ec5h9-1=ac3h5+c2h4 | 1.00E+13 | 0.0 | 30000.0 |
| 1884. | Cc5h9-1+h=c5h10 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1885. | Cc5h9-1+h=c2c5h10 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1886. | Cc5h9-1+h=t2c5h10 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1887. | Cc5h9-1=c4h6+ch3 | 1.34E+15 | -0.5 | 38320.0 |
| 1888. | Cc5h9-1=c5h8-13+h | 4.00E+13 | 0.0 | 47000.0 |
| 1889. | Cc5h9-1+o2=c5h8-13+ho2 | 5.90E+05 | 0.0 | 0.0 |
| 1890. | Cc5h9-1+ho2=>acrol+c2h5+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1891. | Cc5h9-1+h=c5h8-13+h2 | 3.16E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1892. | Cc5h9-1+ch3=c5h8-13+ch4 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1893. | Cc5h9-1+c2h3=c5h8-13+c2h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1894. | Cc5h9-1+c2h5=c5h8-13+c2h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1895. | Cc5h9-1+ac3h5=c5h8-13+c3h6 | 1.33E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1896. | nc4h5+ch3=c5h8-13 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1897. | sc3h5+c2h3=c5h8-13 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1898. | ac3h5+c2h3=c5h8-13 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1899. | ic4h5+ch3=c5h8-13 | 4.80E+37 | -7.6 | 11359.0 |
| 1900. | c5h8-13+o2=acrol+ch3hco | 2.00E+08 | 1.5 | 30200.0 |
| 1901. | c5h8-13+ho2=>acrol+c2h4+oh | 5.00E+11 | 0.0 | 19000.0 |
| 1902. | c5h8-13+ho2=>c4h6+ch2o+oh | 5.00E+11 | 0.0 | 19000.0 |
| 1903. | c5h8-13+oh=ch3hco+ac3h5 | 6.00E+12 | 0.0 | -393.0 |
| 1904. | c5h8-13+oh=ch2o+Cc4h7-1 | 6.00E+12 | 0.0 | -393.0 |
| 1905. | c5h8-13+o=acrol+c2h4 | 4.50E+08 | 1.4 | -858.0 |
| 1906. | c5h8-13+o=ch2o+c4h6 | 4.50E+08 | 1.4 | -858.0 |
| 1907. | c5h8-13+h=c5h7+h2 | 7.00E+06 | 2.0 | 0.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1908. | c5h8-13+h=ac3h5+c2h4 | 3.35E+08 | 1.5 | 2000.0 |
| 1909. | c5h8-13+oh=c5h7+h2o | 7.00E+06 | 2.0 | 0.0 |
| 1910. | c5h8-13+ho2=c5h7+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 1911. | c5h8-13+ch3=c5h7+ch4 | 2.00E+14 | 0.0 | 22800.0 |
| 1912. | c5h8-14+oh=c5h7+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 1913. | c5h8-14+h=c5h7+h2 | 5.50E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 1914. | c5h8-14+o=c5h7+oh | 9.00E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 1915. | c5h8-14+ho2=c5h7+h2o2 | 7.50E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 1916. | c5h8-14+ch3=c5h7+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 1917. | c5h7+o=acrol+c2h3 | 2.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 1918. | c5h7+h=c5h8-13 | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 1919. | c5h7=CPD+h | 2.00E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 1920. | nc4h9hco+h=h2+nc4h9co | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 1921. | nc4h9hco+oh=h2o+nc4h9co | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 1922. | nc4h9hco+ho2=h2o2+nc4h9co | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 1923. | nc4h9hco+ch3=ch4+nc4h9co | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 1924. | nc4h9hco+c2h5=c2h6+nc4h9co | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 1925. | nc4h9co+M=co+pc4h9+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 1926. | nc4h9co+ho2=>co2+oh+pc4h9 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1927. | c4h8hco-2=c3h6+ch2hco | 2.00E+13 | 0.0 | 24367.3 |
| 1928. | c4h8hco-2+o2=c4h7hco-1+ho2 | 7.50E+09 | 0.0 | -2000.0 |
| 1929. | c4h8hco-2+o2=c4h7hco-2+ho2 | 1.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 1930. | c4h7hco-1+h=h2+c4h7co-1 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 1931. | c4h7hco-1+oh=h2o+c4h7co-1 | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 1932. | c4h7hco-1+ho2=h2o2+c4h7co-1 | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 1933. | c4h7hco-1+ch3=ch4+c4h7co-1 | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 1934. | c4h7hco-1+c2h5=c2h6+c4h7co-1 | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 1935. | c4h7co-1=>co+Dc4h7-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1936. | c4h7co-1+ho2=>co2+oh+Dc4h7-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1937. | c4h7hco-2+h=h2+c4h7co-2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 1938. | c4h7hco-2+oh=h2o+c4h7co-2 | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 1939. | c4h7hco-2+ho2=h2o2+c4h7co-2 | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 1940. | c4h7hco-2+ch3=ch4+c4h7co-2 | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 1941. | c4h7hco-2+c2h5=c2h6+c4h7co-2 | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 1942. | c4h7co-2=>co+Cc4h7-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 1943. | c4h7co-2+ho2=>co2+oh+Cc4h7-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1944. | c3h7coch3+oh=c3h6coch3-1+h2o | 2.06E+07 | 1.7 | 753.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.60E+06 | 1.8 | 20170.0 |
| 1945. | c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-1+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.46E+04 | 2.2 | 4442.0 |
| 1946. | c3h7coch3+o=c3h6coch3-1+oh | 2.25E+13 | 0.0 | 7700.0 |
| 1947. | c3h7coch3+h=c3h6coch3-1+h2 | 9.16E+06 | 2.0 | 7700.0 |
| 1948. | c3h7coch3+o2=c3h6coch3-1+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 51310.0 |
| 1949. | c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-1+ch4 | 3.19E+01 | 3.2 | 7172.0 |
| 1950. | c3h7coch3+oh=c3h6coch3-2+h2o | 3.62E+07 | 1.6 | -247.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.67E+05 | 2.0 | 21660.0 |
| 1951. | c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-2+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.37E+11 | 0.1 | 8142.0 |
| 1952. | c3h7coch3+oh=c3h6coch3-3+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.37E+13 | -0.3 | 28700.0 |
| 1953. | c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.33E+13 | -0.6 | 6160.0 |
| 1954. | c3h7coch3+o=c3h6coch3-3+oh | 3.07E+13 | 0.0 | 3400.0 |
| 1955. | c3h7coch3+h=c3h6coch3-3+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 1956. | c3h7coch3+o2=c3h6coch3-3+ho2 | 1.55E+13 | 0.0 | 41970.0 |
| 1957. | c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-3+ch4 | 1.74E+00 | 3.5 | 3680.0 |
| 1958. | c3h7coch3+oh=c3h7coch2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 9.29E+13 | -0.7 | 27730.0 |
| 1959. | c3h7coch3+ho2=c3h7coch2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.57E+07 | 1.5 | 9762.0 |
| 1960. | c3h7coch3+o=c3h7coch2+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 5962.0 |
| 1961. | c3h7coch3+h=c3h7coch2+h2 | 9.30E+12 | 0.0 | 6357.0 |
| 1962. | c3h7coch3+o2=c3h7coch2+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 49150.0 |
| 1963. | c3h7coch3+ch3=c3h7coch2+ch4 | 1.62E+11 | 0.0 | 9630.0 |
| 1964. | c3h6coch3-1+o2=ch3coc3h6o2-1 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1965. | ch3coc3h6o2-1+ho2=ch3coc3h6o2h-1+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 1966. | ch3coc3h6o2h-1=ch3coc3h6o-1+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 1967. | ch2o+ch3coc2h4p=ch3coc3h6o-1 | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 1968. | c3h6coch3-1=c2h4+ch2coch3 | 2.90E+16 | -1.2 | 27000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8600.0 |
| 1969. | c3h6coch3-2=c3h6+ch3co | 2.72E+16 | -1.1 | 25590.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 1970. | c3h6coch3-3=mvk+ch3 | 9.62E+15 | -0.8 | 32390.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 1971. | c3h7coch2=nc3h7+ch2co | 1.23E+18 | -1.4 | 43450.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11600.0 |
| 1972. | c3h7coch2+o2=c3h7coch2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1973. | c3h7coch2o2+ho2=c3h7coch2o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 1974. | c3h7coch2o2h=c3h7coch2o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 1975. | ch2o+nc3h7co=c3h7coch2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 1976. | c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4p+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E+09 | 0.9 | 21030.0 |
| 1977. | c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4p+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+04 | 2.2 | 4472.0 |
| 1978. | c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4p+ho2 | 4.10E+13 | 0.0 | 51310.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.95E+10 | 0.3 | -1882.0 |
| 1979. | c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4p+h2 | 1.83E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 4.79E+05 | 2.0 | 11990.0 |
| 1980. | c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4s+h2o | 1.69E+12 | 0.0 | -228.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.30E+13 | -0.3 | 28740.0 |
| 1981. | c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4s+h2o2 | 4.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 4.63E+13 | -0.7 | 6200.0 |
| 1982. | c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4s+ho2 | 3.10E+13 | 0.0 | 41970.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.54E+12 | 0.0 | -1702.0 |
| 1983. | c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4s+h2 | 8.96E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 4.04E+07 | 1.7 | 17010.0 |
| 1984. | c2h5coc2h4s=c2h5coc2h3+h | 8.70E+16 | -0.8 | 42130.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+13 | 0.0 | 1560.0 |
| 1985. | c2h5coc2h4p=c2h5co+c2h4 | 1.55E+17 | -1.5 | 27840.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.00E+10 | 0.0 | 9600.0 |
| 1986. | c2h5coc2h4p+o2=c2h5coc2h4o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1987. | c2h5coc2h4o2+ho2=c2h5coc2h4o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 1988. | c2h5coc2h4o2h=c2h5coc2h4o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 1989. | ch2o+c2h5coch2=c2h5coc2h4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 1990. | c2h5coc2h3=>c2h3+c2h5co | 7.94E+17 | 0.0 | 84456.0 |
| 1991. | c2h5coc2h3=>c2h3co+c2h5 | 7.94E+17 | 0.0 | 84456.0 |
| 1992. | c2h5coc2h3+oh=c2h5coch2+ch2o | 1.00E+10 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.67E+11 | -0.4 | 18220.0 |
| 1993. | c2h5coc2h3+ho2=c2h5co+ch2hco+oh | 6.03E+09 | 0.0 | 7949.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 1994. | c2h5coc2h3+ch3o2=c2h5co+ch2hco+ch3o | 3.97E+11 | 0.0 | 17050.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 1995. | c2h5coc2h3+oh=pc2h4coc2h3+h2o | 7.55E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.28E+08 | 2.5 | 20210.0 |
| 1996. | c2h5coc2h3+ho2=pc2h4coc2h3+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+03 | 3.8 | 3652.0 |
| 1997. | c2h5coc2h3+ch3o2=pc2h4coc2h3+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+12 | 1.1 | 5822.0 |
| 1998. | c2h5coc2h3+o2=pc2h4coc2h3+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 51310.0 |
| 1999. | c2h5coc2h3+h=pc2h4coc2h3+h2 | 9.16E+06 | 2.0 | 7700.0 |
| 2000. | c2h5coc2h3+c2h3=pc2h4coc2h3+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 10400.0 |
| 2001. | c2h5coc2h3+c2h5=pc2h4coc2h3+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 13400.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2002. | c2h5coc2h3+ch3o=pc2h4coc2h3+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 6460.0 |
| 2003. | c2h5coc2h3+oh=sc2h4coc2h3+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.35E+13 | -0.2 | 28600.0 |
| 2004. | c2h5coc2h3+ho2=sc2h4coc2h3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+13 | -0.5 | 6065.0 |
| 2005. | c2h5coc2h3+ch3o2=sc2h4coc2h3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.79E+14 | -0.7 | 11900.0 |
| 2006. | c2h5coc2h3+o2=sc2h4coc2h3+ho2 | 1.55E+13 | 0.0 | 41970.0 |
| 2007. | c2h5coc2h3+h=sc2h4coc2h3+h2 | 4.48E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2008. | c2h5coc2h3+c2h3=sc2h4coc2h3+c2h4 | 3.00E+11 | 0.0 | 5600.0 |
| 2009. | c2h5coc2h3+c2h5=sc2h4coc2h3+c2h6 | 3.00E+10 | 0.0 | 8600.0 |
| 2010. | c2h5coc2h3+ch3o=sc2h4coc2h3+ch3oh | 1.45E+11 | 0.0 | 2771.0 |
| 2011. | pc2h4coc2h3=c2h3co+c2h4 | 5.26E+14 | 0.4 | 21460.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 11300.0 |
| 2012. | sc2h4coc2h3=ch3chco+c2h3 | 1.64E+16 | -0.7 | 54590.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 12600.0 |
| 2013. | c2h3+c2h3co=divinket | 3.12E+14 | -0.5 | 0.0 |
| 2014. | Dc5h9-2+h=c2c5h10 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2015. | Dc5h9-2+h=t2c5h10 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2016. | Dc5h9-2=c5h8-13+h | 1.20E+14 | 0.0 | 49300.0 |
| 2017. | Dc5h9-2+o2=c5h8-13+ho2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 2018. | Dc5h9-2+ho2=>ch3hco+sc3h5+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2019. | Dc5h9-2+h=c5h8-13+h2 | 3.16E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2020. | Dc5h9-2+ch3=c5h8-13+ch4 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2021. | Dc5h9-2+c2h3=c5h8-13+c2h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2022. | Dc5h9-2+c2h5=c5h8-13+c2h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2023. | Dc5h9-2+ac3h5=c5h8-13+c3h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2024. | Dc5h9-2+Cc4h7-1=c5h8-13+c4h8 | 3.16E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2025. | Ac5h9-1=cyc5h8+h | 2.28E+11 | 0.0 | 18277.0 |
| 2026. | Ac5h9-1+ho2=>nc3h7+ch2co+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 8000.0 |
| 2027. | Ec5h9-1=cyc5h8+h | 6.90E-03 | 0.0 | -4213.0 |
| 2028. | isoph=isope+h | 1.00E+14 | 0.0 | 44000.0 |
| 2029. | isoph=c2h4+tc3h5 | 5.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2030. | isope+ho2=isopy+h2o2 | 2.00E+05 | 2.6 | 13910.0 |
| 2031. | isope+oh=isopy+h2o | 2.00E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 2032. | c4h4+ch3=isopy | 2.50E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2033. | isopy=c2h3+ac3h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 48700.0 |
| 2034. | isopy+o2=ch2o+ch2coc2h3 | 3.08E+09 | 0.4 | 16910.0 |
| 2035. | c4h6+c2h3=c6h9 | 2.00E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2036. | c4h6+c2h3=chD13+h | 7.00E+11 | 0.0 | 1650.0 |
| 2037. | Fc6h9-13=cyc6h9 | 1.00E+08 | 0.9 | 5900.0 |
| 2038. | c6h9=chxe1rD | 1.00E+08 | 0.9 | 5900.0 |
| 2039. | cyc6h9+ho2=chD13+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2040. | cyc6h9+oh=chD13+h2o | 1.80E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2041. | cyc6h9+o2=ho2+chD13 | 9.60E+12 | 0.0 | 15160.0 |
| 2042. | cyc6h9=h+chD13 | 3.00E+13 | 0.0 | 50500.0 |
| 2043. | cyc6h9+o=chD13+oh | 1.80E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2044. | cyc6h9+h=chD13+h2 | 3.16E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2045. | cyc6h9+ch3=chD13+ch4 | 8.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2046. | cyc6h9+c2h3=chD13+c2h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2047. | cyc6h9+c2h5=chD13+c2h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2048. | cyc6h9+ac3h5=chD13+c3h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2049. | cyc6h9+sc3h5=chD13+c3h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2050. | cyc6h9+tc3h5=chD13+c3h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2051. | cyc6h9+hco=chD13+ch2o | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2052. | cyc6h9+ch3o=chD13+ch3oh | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2053. | cyc6h9+ho2=cyc6h9o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2054. | cyc6h9+ho2=>cyc5h8+hco+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2055. | cyc6h9+o=cyc5h8+hco | 8.26E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2056. | cyc6h9+o2=acrol+c2h4+hco | 3.01E+10 | 0.0 | 2870.0 |
| 2057. | cyc6h9+o2=ac3h5co+c2h4o | 1.31E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 2058. | cyc6h9+o2=chxe1qjC | 2.43E+39 | -9.0 | 8620.0 |
| 2059. | chxe1qjC=Echxe1qC | 2.14E+09 | 1.0 | 28226.6 |
| 2060. | Echxe1qC+o2=chxe1qCqjE | 1.84E+45 | -11.1 | 6538.0 |
| 2061. | chxe1qCqjE=chxe1oCqE+oh | 1.07E+09 | 1.0 | 26226.6 |
| 2062. | oh+chxe1oCojE=chxe1oCqE | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2063. | Dc6e5oAoC=chxe1oCojE | 1.00E+08 | 0.9 | 5900.0 |
| 2064. | Fc6e3oAoE=chxe1oCojE | 1.00E+08 | 0.9 | 5900.0 |
| 2065. | Dc6e5oAoC+o=acrol+hcoch2co | 2.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 2066. | Dc6e5oAoC+ho2=oh+acrol+hcoch2co | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2067. | ch2co+ac3h4hco1=Fc6e3oAoE | 2.00E+11 | 0.0 | 2010.0 |
| 2068. | chxe1rD=cyc6h9 | 1.30E+13 | 0.0 | 44500.0 |
| 2069. | chxe1rD=Ac6h9-15 | 2.00E+13 | 0.0 | 35500.0 |
| 2070. | chxe1rD+o2=ho2+chD13 | 9.60E+12 | 0.0 | 2500.0 |
| 2071. | chxe1rD=h+chD13 | 3.20E+13 | 0.0 | 34500.0 |
| 2072. | chxe1rD+o2=ho2+chD14 | 9.60E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2073. | chxe1rD=h+chD14 | 3.00E+13 | 0.0 | 33800.0 |
| 2074. | Fc6e5oA=cyc6h9o | 1.00E+08 | 0.9 | 5900.0 |
| 2075. | c2h2+c3h6hco-1=Fc6e5oA | 7.77E+06 | 1.4 | 7755.0 |
| 2076. | Fc6e2oA=cyc6h9o | 1.00E+08 | 0.9 | 5900.0 |
| 2077. | c2h4+sc3h5co=Fc6e2oA | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2078. | sc3h5co=sc3h5+co | 8.60E+15 | 0.0 | 23000.0 |
| 2079. | Fc6h9-13+o2=hex135+ho2 | 2.70E+11 | 0.0 | 2500.0 |
| 2080. | Fc6h9-13=hex135+h | 3.20E+13 | 0.0 | 34800.0 |
| 2081. | Fc6h9-13=nc4h5+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 35500.0 |
| 2082. | Fc6h9-13+h=c6h10-13 | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 2083. | c6h9=h+hex135 | 3.20E+13 | 0.0 | 40700.0 |
| 2084. | c6h9+o2=ho2+hex135 | 1.60E+12 | 0.0 | 15160.0 |
| 2085. | Ac6h9-15=c6h9 | 6.00E+08 | 1.0 | 12400.0 |
| 2086. | Ac6h9-15=c2h2+Dc4h7-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 33000.0 |
| 2087. | Ac6h9-15+o2=Dc4h7-1+co+ch2o | 4.50E+16 | -1.4 | 1000.0 |
| 2088. | Ac6h9-15+h=c6h10-15 | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 2089. | hex135=chD13 | 4.50E+12 | 0.0 | 43300.0 |
| 2090. | chD13=c6h6+h2 | 5.00E+14 | 0.0 | 65140.0 |
| 2091. | chD13=c6h7C+h | 5.01E+15 | 0.0 | 72598.0 |
| 2092. | chD13+o2=c6h7C+ho2 | 8.31E+11 | 0.0 | 24858.0 |
| 2093. | chD13+ho2=c6h7C+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 17057.0 |
| 2094. | chD13+oh=c6h7C+h2o | 5.60E+12 | 0.0 | 861.0 |
| 2095. | chD13+o=c6h7C+oh | 1.40E+13 | 0.0 | -795.0 |
| 2096. | chD13+h=c6h7C+h2 | 1.30E+13 | 0.0 | 4445.0 |
| 2097. | chD13+ch3=c6h7C+ch4 | 1.23E+11 | 0.0 | 5201.0 |
| 2098. | chD13+c2h5=c6h7C+c2h6 | 1.23E+11 | 0.0 | 5201.0 |
| 2099. | chD13+c2h2=c6h6+c2h4 | 3.09E+10 | 0.0 | 27151.0 |
| 2100. | chD13+c2h3=c6h7C+c2h4 | 1.23E+11 | 0.0 | 5201.0 |
| 2101. | chD13+ac3h5=c6h7C+c3h6 | 1.23E+11 | 0.0 | 5201.0 |
| 2102. | chD13+hco=c6h7C+ch2o | 1.23E+11 | 0.0 | 5201.0 |
| 2103. | chD13+ch3o=c6h7C+ch3oh | 1.23E+11 | 0.0 | 5201.0 |
| 2104. | chD13+nc4h5=c6h7C+c4h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 13500.0 |
| 2105. | chD13+ic4h5=c6h7C+c4h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 13500.0 |
| 2106. | chD14=c6h6+h2 | 2.30E+12 | 0.0 | 43800.0 |
| 2107. | chD14=c6h7C+h | 3.10E+14 | 0.0 | 77400.0 |
| 2108. | chD14+o2=c6h7C+ho2 | 7.20E+12 | 0.0 | 27920.0 |
| 2109. | chD14+ho2=c6h7C+h2o2 | 1.28E+04 | 2.6 | 12400.0 |
| 2110. | chD14+h=c6h7C+h2 | 1.10E+05 | 2.5 | -1900.0 |
| 2111. | chD14+oh=c6h7C+h2o | 6.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 2112. | chD14+ch3=c6h7C+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 2113. | c2h2+nc4h5(+m)=c6h7C(+m) | 4.80E+07 | 0.3 | 4700.0 |
| | Low pressure limit: 0.52000E+26 -0.42100E+01 0.40000E+04 | | | |
| 2114. | c6h7C=>c6h6+h | 1.00E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 2115. | c6h7C+o2=c6h6+ho2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2116. | c6h7C+ho2=c6h6+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2117. | c6h7C+oh=c6h6+h2o | 6.02E+12 | 0.0 | 0.0 |

```
2118. c6h7C+o=c6h6+oh                          1.80E+13    0.0        0.0
2119. c6h7C+h=c6h6+h2                          3.16E+12    0.0        0.0
2120. c6h7C+ch3=c6h6+ch4                       1.00E+13    0.0        0.0
2121. c6h7C+c2h3=c6h6+c2h4                     4.00E+12    0.0        0.0
2122. c6h7C+c2h5=c6h6+c2h6                     4.00E+12    0.0        0.0
2123. c6h7C+ac3h5=c6h6+c3h6                    4.00E+12    0.0        0.0
2124. c6h7C+sc3h5=c6h6+c3h6                    4.00E+12    0.0        0.0
2125. c6h7C+tc3h5=c6h6+c3h6                    4.00E+12    0.0        0.0
2126. c6h7C+hco=c6h6+ch2o                      4.00E+12    0.0        0.0
2127. c6h7C+c6h7C=c6h6+chD13                   8.40E+10    0.0     -300.0
2128. c6h7C+h=c6h615+h2                        2.00E+13    0.0        0.0
2129. c6h7C+ho2=>CPD+hco+oh                    4.50E+12    0.0        0.0
2130. c6h7C+o=CPD+hco                          8.26E+13    0.0        0.0
2131. cyc5h8=c3h6+c2h2                         2.50E+13    0.0    62970.0
2132. cyc5h8=CPD+h2                            1.58E+13    0.0    59780.0
2133. cyc5h8+o2=cyc5h7+ho2                     1.28E+10    0.0    25000.0
2134. cyc5h8+ho2=cyc5h7+h2o2                   1.60E+11    0.0    17060.0
2135. cyc5h8+oh=cyc5h7+h2o                     4.80E+13    0.0      300.0
2136. cyc5h8+o=cyc5h7+oh                       2.78E+11    0.0     2508.0
2137. cyc5h7=ac3h4+c2h3                        3.16E+14    0.0    37000.0
2138. cyc5h7=CPD+h                             3.16E+15    0.0    36000.0
2139. cyc5h7=c5h7                              2.00E+13    0.0    30000.0
2140. cyc5h7+o2=acrol+ch2hco                   4.00E+10    0.0     5000.0
2141. cyc5h7+o2=CPD+ho2                        1.01E+12    0.0    13353.0
2142. cyc5h7+ho2=CPD+h2o2                      2.65E+12    0.0        0.0
2143. cyc5h7+oh=CPD+h2o                        6.02E+12    0.0        0.0
2144. cyc5h7+o=CPD+oh                          1.80E+13    0.0        0.0
2145. cyc5h7+h=CPD+h2                          3.16E+13    0.0        0.0
2146. c3h3+c3h3=c6h615                         4.00E+12    0.0        0.0
2147. c6h615=hex1245                           1.80E+11    0.0    35804.0
2148. hex1245=mc6h6                            5.00E+11    0.0    22081.0
2149. mc6h6=fulvene                            4.26E+13    0.0    49282.0
2150. mc6h6=c6h6                               3.79E+13    0.0    22000.0
2151. CPD+o2=c5h5+ho2                          2.00E+13    0.0    25000.0
2152. CPD+ho2=c5h5+h2o2                        2.00E+12    0.0    11660.0
2153. CPD+oh=c5h5+h2o                          3.43E+09    1.2     -447.0
2154. CPD+h=c5h5+h2                            2.19E+08    1.8     3000.0
2155. CPD+h=c3h3+c2h4                          2.00E+14    0.0    10000.0
2156. CPD+o=c5h5+oh                            1.81E+13    0.0     3080.0
2157. CPD+ch3=c5h5+ch4                         3.11E+11    0.0     5500.0
2158. CPD+c2h3=c5h5+c2h4                       3.11E+11    0.0     5500.0
2159. CPD+c2h5=c5h5+c2h6                       3.11E+11    0.0     5500.0
2160. CPD+nc4h5=c5h5+c4h6                      3.11E+11    0.0     5500.0
2161. CPD+ic4h5=c5h5+c4h6                      3.11E+11    0.0     5500.0
2162. CPD+c6h5=c5h5+c6h6                       3.11E+11    0.0     5500.0
2163. CPD+o2=>c3h4o+ch2co                      3.00E+08    0.0     3000.0
2164. c5h5+ho2=c5h5o+oh                        3.00E+13    0.0        0.0
2165. c5h5o=nc4h5+co                           2.51E+11    0.0    43900.0
2166. c5h5+oh=c5h4oh+h                         9.00E+13    0.0        0.0
2167. c5h5+oh=c4h6+co                          4.00E+14    0.0     4500.0
2168. c5h5+h(+m)=CPD(+m)                       1.00E+14    0.0        0.0
    Low pressure limit:  0.44000E+81 -0.18280E+02  0.12994E+05
    TROE centering:      0.68000E-01  0.40000E+03  0.41360E+04  0.55000E+04
2169. c5h5+o=c5h4o+h                           5.81E+13    0.0       20.0
2170. c5h5+o=nc4h5+co                          2.00E+14    0.0        0.0
2171. c5h4oh=c5h4o+h                           2.10E+13    0.0    48000.0
2172. c5h4o+h=nc4h5+co                         2.10E+61  -13.3    40810.0
2173. c5h4o=>co+c4h4                           1.00E+12    0.0    53000.0
2174. c3h3+ac3h4=c6h6+h                        1.40E+12    0.0    12800.0
2175. c3h3+pc3h4=c6h6+h                        1.40E+12    0.0    12800.0
2176. c4h4+c2h3=c6h6+h                         1.90E+12    0.0     3510.0
2177. nc4h3+c2h3=c6h6                          2.87E+14    0.0      817.0
2178. c6h6=c4h4+c2h2                           9.00E+15    0.0   107430.0
2179. c6h6+o2=c6h5+ho2                         6.30E+13    0.0    60000.0
2180. c6h6+ho2=c6h5+h2o2                       5.40E+04    2.5    27620.0
2181. c6h6+oh=c6h5+h2o                         1.69E+13    0.0     4574.0
2182. c6h6+h=c6h5+h2                           2.50E+14    0.0    16000.0
2183. c6h6+o=c6h5o+h                           3.56E+01    3.8      940.0
2184. c6h6+ch3=c6h5+ch4                        2.00E+12    0.0    15000.0
2185. c6h6+c2h5=c6h5+c2h6                      2.00E+12    0.0    15000.0
2186. c6h6+c2h3=c6h5+c2h4                      2.00E+12    0.0    15000.0
2187. c6h6+nc4h5=c6h5+c4h6                     2.00E+12    0.0    15000.0
2188. c6h6+ic4h5=c6h5+c4h6                     2.00E+12    0.0    15000.0
2189. c6h6+o=c6h5+oh                           2.00E+13    0.0    14700.0
2190. nc4h3+c2h2=c6h5                          2.80E+03    2.9     1400.0
2191. ic4h3+c2h2=c6h5                          3.00E+11    0.0    14900.0
2192. c6h5+o2=c6h5o+o                          6.27E+12    0.0     7470.0
2193. c6h4o2=c5h4o+co                          1.00E+12    0.0    40000.0
2194. c6h5+h=c6h6                              2.20E+14    0.0        0.0
2195. c6h5+ho2=c6h5o+oh                        5.00E+13    0.0     1000.0
2196. c6h5+oh=c6h5o+h                          5.00E+13    0.0        0.0
2197. c6h5+c2h=phc2h                           3.00E+08    0.0     1391.0
2198. c6h5+c2h4=styren+h                       1.43E+08    1.2     3540.0
2199. c6h5+c2h2=phc2h+h                        1.00E+13    0.0     7647.0
2200. c6h5+c4h2=phc2h+c2h                      2.00E+13    0.0        0.0
2201. c6h5+c4h4=phc2h+c2h3                     1.00E+13    0.0     7647.0
2202. c6h5oh+oh=c6h5o+h2o                      6.00E+12    0.0        0.0
2203. c6h5oh+h=c6h6+oh                         2.21E+13    0.0     7910.0
2204. c6h5oh+h=c6h5o+h2                        1.15E+14    0.0    12400.0
2205. c6h5oh+o=c6h5o+oh                        2.81E+13    0.0     7352.0
2206. c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4                     3.00E+02    3.0     7650.0
2207. c6h5oh+c2h5=c6h5o+c2h6                   3.00E+02    3.0     7650.0
2208. c6h5oh+c2h3=c6h5o+c2h4                   3.00E+02    3.0     7650.0
2209. c6h5oh+nc4h5=c6h5o+c4h6                  3.00E+02    3.0     7650.0
2210. c6h5oh+ic4h5=c6h5o+c4h6                  3.00E+02    3.0     7650.0
2211. c6h5o+CPD=c6h5oh+c5h5                    3.20E+11    0.0     8000.0
2212. c6h5oh+c6h5=c6h5o+c6h6                   3.00E+02    3.0     7650.0
2213. c6h5o=c5h5+co                            7.40E+11    0.0    43917.0
2214. c6h5o+h(+m)=c6h5oh(+m)                   2.50E+14    0.0        0.0
    Low pressure limit:  0.10000E+95 -0.21840E+02  0.13880E+05
    TROE centering:      0.43000E-01  0.30400E+03  0.60000E+05  0.59000E+04
2215. c6h5o+h=CPD+co                           1.06E+53  -10.7    41360.0
2216. c6h5o+o=c5h5+co2                         1.00E+13    0.0        0.0
2217. che24one=>c6h5o+h                        1.40E+15    0.0    54000.0
2218. che24one+h=cyc5h7+co                     2.51E+13    0.0     4700.0
2219. che24one+o2=c6h5o+ho2                    4.00E+12    0.0    40000.0
2220. che24one+ho2=c6h5o+h2o2                  9.63E+03    2.6    13910.0
2221. che24one+oh=c6h5o+h2o                    3.12E+06    2.0     -298.0
2222. che24one+o=c6h5o+oh                      2.60E+12    0.0     4500.0
2223. che24one+h=c6h5o+h2                      1.95E+13    0.0     4445.0
2224. che24one+ch3=c6h5o+ch4                   1.00E+11    0.0     7300.0
2225. nc4h5+ac3h4=toluen+h                     2.00E+11    0.0     3700.0
2226. nc4h5+pc3h4=toluen+h                     6.32E+11    0.0     3700.0
2227. toluen=c6h5+ch3                          1.40E+16    0.0    99800.0
2228. toluen=phch2+h                           3.00E+15    0.0    88194.0
2229. toluen+o2=phch2+ho2                      3.00E+14    0.0    43062.0
2230. toluen+ho2=phch2+h2o2                    3.00E+14    0.0    22010.0
2231. toluen+oh=phch2+h2o                      1.77E+05    2.4     -602.0
2232. toluen+oh=c6h5oh+ch3                     7.83E+02    2.9     3221.0
2233. toluen+o=phch2+oh                        6.30E+11    0.0        0.0
2234. toluen+h=phch2+h2                        1.26E+14    0.0     8364.0
2235. toluen+h=c6h6+ch3                        2.40E+13    0.0     5123.0
```

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2236. | toluen+ch3=phch2+ch4 | 8.88E+10 | 0.0 | 8754.0 |
| 2237. | toluen+c2h5=phch2+c2h6 | 1.01E+11 | 0.0 | 9514.0 |
| 2238. | toluen+c6h5=phch2+c6h6 | 2.10E+12 | 0.0 | 4400.0 |
| 2239. | toluen+nc4h5=phch2+c4h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 7500.0 |
| 2240. | toluen+c2h3=phch2+c2h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 7500.0 |
| 2241. | phch2=c4h4+c3h3 | 2.00E+14 | 0.0 | 83600.0 |
| 2242. | phch2=c5h5+c2h2 | 6.03E+13 | 0.0 | 70000.0 |
| 2243. | phch2+o2=phhco+oh | 6.31E+12 | 0.0 | 43000.0 |
| 2244. | phch2+ho2=phch2o+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2245. | phch2+oh=phch2oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2246. | phch2+o=phhco+h | 1.58E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2247. | phch2+o=c6h5+ch2o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2248. | phch2+c3h3=toluen+c3h2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2249. | phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o | 1.05E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 2250. | phch2oh+o2=>phhco+ho2+h | 2.00E+14 | 0.0 | 41400.0 |
| 2251. | phch2oh+oh=>phhco+h2o+h | 8.43E+12 | 0.0 | 2583.0 |
| 2252. | phch2oh+h=c6h6+ch2oh | 1.20E+13 | 0.0 | 5148.0 |
| 2253. | phch2oh+phch2=>phhco+toluen+h | 2.11E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 2254. | phch2oh+c6h5=>phhco+c6h6+h | 1.40E+12 | 0.0 | 4400.0 |
| 2255. | phch2o=phhco+h | 1.30E+14 | 0.0 | 1100.0 |
| 2256. | phhco=phco+h | 3.98E+15 | 0.0 | 83701.0 |
| 2257. | phhco+o2=phco+ho2 | 1.02E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| 2258. | phhco+ho2=phco+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 11665.0 |
| 2259. | phhco+oh=phco+h2o | 1.71E+09 | 1.2 | -447.0 |
| 2260. | phhco+oh=c6h5oh+hco | 1.20E+13 | 0.0 | 5123.0 |
| 2261. | phhco+o=phco+oh | 9.04E+12 | 0.0 | 3080.0 |
| 2262. | phhco+h=phco+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 4928.0 |
| 2263. | phhco+h=c6h6+hco | 1.20E+13 | 0.0 | 5148.0 |
| 2264. | phhco+ch3=phco+ch4 | 2.77E+03 | 2.8 | 5773.0 |
| 2265. | phhco+c6h5=phco+c6h6 | 7.01E+11 | 0.0 | 4400.0 |
| 2266. | phco=c6h5+co | 3.98E+14 | 0.0 | 29401.0 |
| 2267. | phco+o2=c6h5o+co2 | 3.00E+10 | 0.0 | 2870.0 |
| 2268. | phco+ho2=>c6h5+co2+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2269. | nc10h22+phch2=Ac10h21+toluen | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| 2270. | nc10h22+phch2=Bc10h21+toluen | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2271. | nc10h22+phch2=Cc10h21+toluen | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2272. | nc10h22+phch2=Dc10h21+toluen | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2273. | nc10h22+phch2=Ec10h21+toluen | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2274. | c10h21qA+phch2=c10h21qjA+toluen | 1.05E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 2275. | c10h21qB+phch2=c10h21qjB+toluen | 1.05E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 2276. | c10h21qC+phch2=c10h21qjC+toluen | 1.05E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 2277. | c10h21qD+phch2=c10h21qjD+toluen | 1.05E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 2278. | c10h21qE+phch2=c10h21qjE+toluen | 1.05E+11 | 0.0 | 9500.0 |
| 2279. | nc10h22+c6h5=Ac10h21+c6h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| 2280. | nc10h22+c6h5=Bc10h21+c6h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2281. | nc10h22+c6h5=Cc10h21+c6h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2282. | nc10h22+c6h5=Dc10h21+c6h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2283. | nc10h22+c6h5=Ec10h21+c6h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 2284. | hoch2o=hocho+h | 1.00E+14 | 0.0 | 14900.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 5.92E+11 | 0.6 | 12300.0 |
| 2285. | hocho+m=co+h2o+m | 2.30E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+10 | 0.5 | 46840.0 |
| 2286. | hocho+m=co2+h2+m | 1.50E+16 | 0.0 | 57000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+14 | 0.5 | 61020.0 |
| 2287. | hocho=hco+oh | 4.59E+18 | -0.5 | 108300.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 2288. | ch2o+ocho=hco+hocho | 5.60E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.58E+11 | 0.0 | 26750.0 |
| 2289. | ocho+ho2=hocho+o2 | 3.50E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.70E+12 | -0.3 | 52690.0 |
| 2290. | ocho+h2o2=hocho+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.79E+11 | 0.4 | 24790.0 |
| 2291. | hocho+oh=>h2o+co2+h | 2.62E+06 | 2.1 | 916.0 |
| 2292. | hocho+oh=>h2o+co+oh | 1.85E+07 | 1.5 | -962.0 |
| 2293. | hocho+h=>h2+co2+h | 4.24E+06 | 2.1 | 4868.0 |
| 2294. | hocho+h=>h2+co+oh | 6.03E+13 | -0.3 | 2988.0 |
| 2295. | hocho+ch3=>ch4+co+oh | 3.90E-07 | 5.8 | 2200.0 |
| 2296. | hocho+ho2=>h2o2+co+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| 2297. | hocho+o=>co+oh+oh | 1.77E+18 | -1.9 | 2975.0 |
| 2298. | choch2ch2cho+oh=h2o+choch2ch2co | 5.38E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 2299. | choch2ch2cho+h=h2+choch2ch2co | 8.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 2300. | choch2ch2cho+o=oh+choch2ch2co | 1.00E+13 | 0.0 | 1790.0 |
| 2301. | choch2ch2cho+ch3=ch4+choch2ch2co | 3.40E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 2302. | choch2ch2cho+ho2=h2o2+choch2ch2co | 5.60E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 2303. | choch2ch2cho+o2=ho2+choch2ch2co | 4.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 2304. | choch2ch2co+M=co+ch2ch2hco+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 2305. | choch2ch2co+ho2=oh+co2+ch2ch2hco | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2306. | c2h5coc3h6-1=c2h5coch2+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 27000.0 |
| 2307. | c2h5coc3h6-1+o2=c2h5coc3h6o2-1 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2308. | c2h5coc3h6o2-1+ho2=c6h11oCqF+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2309. | nc3h7coc2h4p=nc3h7co+c2h4 | 1.55E+17 | -1.5 | 27840.0 |
| 2310. | nc3h7coc2h4p+o2=nc3h7coc2h4o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2311. | nc3h7coc2h4o2+ho2=c6h11oCqA+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2312. | nc4h9coc2h4p=nc4h9co+c2h4 | 1.55E+17 | -1.5 | 27840.0 |
| 2313. | nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2314. | nc4h9coc2h4o2+ho2=c7h13oCqA+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2315. | nc3h7coc3h6-1=c3h7coch2+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 27000.0 |
| 2316. | nc3h7coc3h6-1+o2=nc3h7coc3h6o2-1 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2317. | nc3h7coc3h6o2-1+ho2=c7h13oDqA+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2318. | nc6h13coch2=Ac6h13+ch2co | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 2319. | nc6h13coch2+o2=nc6h13coch2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2320. | nc6h13coch2o2+ho2=nc6h13coch2o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2321. | nc6h13coch2o2h=nc6h13coch2o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2322. | ch2o+c6h13co=nc6h13coch2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2323. | nc5h11coc2h4p=c5h11co+c2h4 | 1.55E+17 | -1.5 | 27840.0 |
| 2324. | nc5h11coc2h4p+o2=nc5h11coc2h4o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2325. | nc5h11coc2h4o2+ho2=nc5h11coc2h4o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2326. | nc5h11coc2h4o2h=nc5h11coc2h4o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2327. | ch2o+nc5h11coch2=nc5h11coc2h4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2328. | nc7h15coch2=Ac7h15+ch2co | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 2329. | nc7h15coch2+o2=nc7h15coch2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2330. | nc7h15coch2o2+ho2=nc7h15coch2o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2331. | nc7h15coch2o2h=nc7h15coch2o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2332. | ch2o+c7h15co=nc7h15coch2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2333. | nc6h13coc2h4p=c6h13co+c2h4 | 1.55E+17 | -1.5 | 27840.0 |
| 2334. | nc6h13coc2h4p+o2=nc6h13coc2h4o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2335. | nc6h13coc2h4o2+ho2=nc6h13coc2h4o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2336. | nc6h13coc2h4o2h=nc6h13coc2h4o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2337. | ch2o+nc6h13coch2=nc6h13coc2h4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2338. | c2h4+nc5h11coch2=nc5h11coc3h6-1 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2339. | nc5h11coc3h6-1+o2=nc5h11coc3h6o2-1 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2340. | nc5h11coc3h6o2-1+ho2=npecoc3h6o2h-1+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2341. | npecoc3h6o2h-1=nc5h11coc3h6o-1+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2342. | ch2o+nc5h11coc2h4p=nc5h11coc3h6o-1 | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2343. | nc5h11coch2=Ac5h11+ch2co | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 2344. | nc5h11coch2+o2=nc5h11coch2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2345. | nc5h11coch2o2+ho2=c7h13oBqA+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2346. | c2h4+nc4h9coch2=nc4h9coc3h6-1 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2347. | nc4h9coc3h6-1+o2=nc4h9coc3h6o2-1 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2348. | nc4h9coc3h6o2-1+ho2=nc4h9coc3h6o2h-1+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2349. | nc4h9coc3h6o2h-1=nc4h9coc3h6o-1+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2350. | ch2o+nc4h9coc2h4p=nc4h9coc3h6o-1 | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2351. | nc4h9coch2=pc4h9+ch2co | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 2352. | nc4h9coch2+o2=nc4h9coch2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2353. | nc4h9coch2o2+ho2=c6h11oBqA+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2354. | ch3coc5h9-1+oh=ch2coc5h9-1+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| 2355. | ch3coc5h9-1+ho2=ch2coc5h9-1+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| 2356. | ch3coc5h9-1+h=ch2coc5h9-1+h2 | 9.30E+12 | 0.0 | 6357.0 |
| 2357. | ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-15+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| 2358. | ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-15+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| 2359. | ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-15+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2360. | ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-13+h2o | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 2361. | ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-13+h2o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 17060.0 |
| 2362. | ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-13+h2 | 6.55E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 2363. | ch2co+Ec5h9-1=ch2coc5h9-1 | 3.33E+10 | 0.0 | 6397.0 |
| 2364. | mvk+ac3h5=ch3coc5h8-15 | 8.80E+03 | 2.5 | 6130.0 |
| 2365. | c4h6+ch2coch3=ch3coc5h8-13 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2366. | c2h5coc5h9-1+oh=sc2h4coc5h9-1+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| 2367. | c2h5coc5h9-1+ho2=sc2h4coc5h9-1+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| 2368. | c2h5coc5h9-1+h=sc2h4coc5h9-1+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2369. | c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-15+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| 2370. | c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-15+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| 2371. | c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-15+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2372. | c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-13+h2o | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 2373. | c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-13+h2o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 17060.0 |
| 2374. | c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-13+h2 | 6.55E+12 | 0.0 | 4445.0 |
| 2375. | ch3chco+Ec5h9-1=sc2h4coc5h9-1 | 3.33E+10 | 0.0 | 6397.0 |
| 2376. | c2h5coc2h3+ac3h5=c2h5coc5h8-15 | 8.80E+03 | 2.5 | 6130.0 |
| 2377. | c4h6+c2h5coch2=c2h5coc5h8-13 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2378. | c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-3+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| 2379. | c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| 2380. | c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-3+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2381. | c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-2+h2o | 3.16E+07 | 1.6 | -247.0 |
| 2382. | c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-2+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 2383. | c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-2+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2384. | divinket+ch3=c2h3coc3h6-3 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2385. | c3h6+c2h3co=c2h3coc3h6-2 | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2386. | c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-4+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| 2387. | c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-4+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| 2388. | c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-4+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2389. | c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-3+h2o | 3.16E+07 | 1.6 | -247.0 |
| 2390. | c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-3+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 2391. | c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-3+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2392. | divinket+c2h5=c2h3coc4h8-4 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2393. | c4h8+c2h3co=c2h3coc4h8-3 | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2394. | c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-5+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| 2395. | c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-5+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| 2396. | c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-5+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2397. | c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-4+h2o | 3.16E+07 | 1.6 | -247.0 |
| 2398. | c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-4+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 2399. | c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-4+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2400. | divinket+nc3h7=c2h3coc5h10-5 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2401. | c5h10+c2h3co=c2h3coc5h10-4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2402. | c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-6+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| 2403. | c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-6+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| 2404. | c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-6+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| 2405. | c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-5+h2o | 3.16E+07 | 1.6 | -247.0 |
| 2406. | c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-5+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 2407. | c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-5+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2408. | divinket+pc4h9=c2h3coc6h12-6 | 1.32E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 2409. | c6h12-1+c2h3co=c2h3coc6h12-5 | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2410. | ch3chco+oh=c2h5+co2 | 1.73E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| 2411. | ch3chco+oh=ch3choh+co | 2.00E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| 2412. | ch3chco+h=c2h5+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 |
| 2413. | ch3chco+o=ch3hco+co | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 |
| 2414. | mo=mo8j+h | 7.90E+15 | 0.0 | 97970.0 |
| 2415. | mo=mo7j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 2416. | mo=mo6j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 2417. | mo=mo5j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 2418. | mo=mo4j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 2419. | mo=mo3j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 2420. | mo2j+h=mo | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 2421. | mo=mmomj+h | 7.90E+15 | 0.0 | 93970.0 |
| 2422. | mo=mhp7j+ch3 | 5.00E+16 | 0.0 | 84660.0 |
| 2423. | mo=mhx6j+c2h5 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 2424. | mo=mpe5j+nc3h7 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 2425. | mo=mb4j+pc4h9 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 2426. | mo=mp3j+Ac5h11 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 2427. | mo=me2j+Ac6h13 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 2428. | mo=ch3oco+Ac7h15 | 1.13E+16 | 0.0 | 77700.0 |
| 2429. | c7h15co+ch3o=mo | 1.50E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2430. | mo=oaoj+ch3 | 3.16E+16 | 0.0 | 83070.0 |
| 2431. | mo+o2=mo8j+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 2432. | mo+o2=mo7j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 2433. | mo+o2=mo6j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 2434. | mo+o2=mo5j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 2435. | mo+o2=mo4j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 2436. | mo+o2=mo3j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 2437. | mo+o2=mo2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2438. | mo+o2=mmomj+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 44910.0 |
| 2439. | mo+h=mo8j+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| 2440. | mo+h=mo7j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2441. | mo+h=mo6j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2442. | mo+h=mo5j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2443. | mo+h=mo4j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2444. | mo+h=mo3j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 2445. | mo+h=mo2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 2446. | mo+h=mmomj+h2 | 1.44E+13 | 0.0 | 6095.0 |
| 2447. | mo+o=mo8j+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 2448. | mo+o=mo7j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 2449. | mo+o=mo6j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 2450. | mo+o=mo5j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 2451. | mo+o=mo4j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 2452. | mo+o=mo3j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 2453. | mo+o=mo2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 2454. | mo+o=mmomj+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 2455. | mo+oh=mo8j+h2o | 5.25E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| 2456. | mo+oh=mo7j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 2457. | mo+oh=mo6j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 2458. | mo+oh=mo5j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 2459. | mo+oh=mo4j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 2460. | mo+oh=mo3j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 2461. | mo+oh=mo2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 2462. | mo+oh=mmomj+h2o | 7.10E+06 | 1.8 | -596.0 |
| 2463. | mo+ho2=mo8j+h2o2 | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2464. | mo+ho2=mo7j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2465. | mo+ho2=mo6j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2466. | mo+ho2=mo5j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2467. | mo+ho2=mo4j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2468. | mo+ho2=mo3j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2469. | mo+ho2=mo2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 2470. | mo+ho2=mmomj+h2o2 | 9.64E+10 | 0.0 | 12580.0 |
| 2471. | mo+hco=mo8j+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 2472. | mo+hco=mo7j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2473. | mo+hco=mo6j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 2474. | mo+hco=mo5j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 2475. | mo+hco=mo4j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 2476. | mo+hco=mo3j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 2477. | mo+hco=mo2j+ch2o | 1.14E+09 | 1.3 | 15500.0 |
| 2478. | mo+hco=mmomj+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 2479. | mo+ch3=mo8j+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 2480. | mo+ch3=mo7j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 2481. | mo+ch3=mo6j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 2482. | mo+ch3=mo5j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 2483. | mo+ch3=mo4j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 2484. | mo+ch3=mo3j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 2485. | mo+ch3=mo2j+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 2486. | mo+ch3=mmomj+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 2487. | mo+ch3o=mo8j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 2488. | mo+ch3o=mo7j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2489. | mo+ch3o=mo6j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2490. | mo+ch3o=mo5j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2491. | mo+ch3o=mo4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2492. | mo+ch3o=mo3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2493. | mo+ch3o=mo2j+ch3oh | 1.78E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 2494. | mo+ch3o=mmomj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 2495. | mo+ch2oh=mo8j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 2496. | mo+ch2oh=mo7j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2497. | mo+ch2oh=mo6j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2498. | mo+ch2oh=mo5j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2499. | mo+ch2oh=mo4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2500. | mo+ch2oh=mo3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2501. | mo+ch2oh=mo2j+ch3oh | 3.60E+01 | 3.0 | 1000.0 |
| 2502. | mo+ch2oh=mmomj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 2503. | mo+ch3o2=mo8j+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2504. | mo+ch3o2=mo7j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2505. | mo+ch3o2=mo6j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2506. | mo+ch3o2=mo5j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2507. | mo+ch3o2=mo4j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2508. | mo+ch3o2=mo3j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2509. | mo+ch3o2=mo2j+ch3o2h | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 2510. | mo+ch3o2=mmomj+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2511. | mo+c2h3=mo8j+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 2512. | mo+c2h3=mo7j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 2513. | mo+c2h3=mo6j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 2514. | mo+c2h3=mo5j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 2515. | mo+c2h3=mo4j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 2516. | mo+c2h3=mo3j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 2517. | mo+c2h3=mo2j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| 2518. | mo+c2h3=mmomj+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 2519. | mo+c2h5=mo8j+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 2520. | mo+c2h5=mo7j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 2521. | mo+c2h5=mo6j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 2522. | mo+c2h5=mo5j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 2523. | mo+c2h5=mo4j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 2524. | mo+c2h5=mo3j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 2525. | mo+c2h5=mo2j+c2h6 | 2.20E+00 | 3.5 | 4140.0 |
| 2526. | mo+c2h5=mmomj+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 2527. | mo+ac3h5=mo8j+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 2528. | mo+ac3h5=mo7j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2529. | mo+ac3h5=mo6j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2530. | mo+ac3h5=mo5j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2531. | mo+ac3h5=mo4j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2532. | mo+ac3h5=mo3j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2533. | mo+ac3h5=mo2j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 17170.0 |
| 2534. | mo+ac3h5=mmomj+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 2535. | mo+mo2j=mo8j+mo | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 2536. | mo+mo2j=mo7j+mo | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2537. | mo+mo2j=mo6j+mo | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2538. | mo+mo2j=mo5j+mo | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2539. | mo+mo2j=mo4j+mo | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2540. | mo+mo2j=mo3j+mo | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 2541. | mo+mo2j=mmomj+mo | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 2542. | mo+mo8oo=mo8j+mo8ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2543. | mo+mo8oo=mo7j+mo8ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2544. | mo+mo8oo=mo6j+mo8ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2545. | mo+mo8oo=mo5j+mo8ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2546. | mo+mo8oo=mo4j+mo8ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2547. | mo+mo8oo=mo3j+mo8ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2548. | mo+mo8oo=mo2j+mo8ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2549. | mo+mo8oo=mmomj+mo8ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2550. | mo+mo7oo=mo8j+mo7ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2551. | mo+mo7oo=mo7j+mo7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2552. | mo+mo7oo=mo6j+mo7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2553. | mo+mo7oo=mo5j+mo7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2554. | mo+mo7oo=mo4j+mo7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2555. | mo+mo7oo=mo3j+mo7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2556. | mo+mo7oo=mo2j+mo7ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2557. | mo+mo7oo=mmomj+mo7ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2558. | mo+mo6oo=mo8j+mo6ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2559. | mo+mo6oo=mo7j+mo6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2560. | mo+mo6oo=mo6j+mo6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2561. | mo+mo6oo=mo5j+mo6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2562. | mo+mo6oo=mo4j+mo6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2563. | mo+mo6oo=mo3j+mo6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2564. | mo+mo6oo=mo2j+mo6ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2565. | mo+mo6oo=mmomj+mo6ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2566. | mo+mo5oo=mo8j+mo5ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2567. | mo+mo5oo=mo7j+mo5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2568. | mo+mo5oo=mo6j+mo5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2569. | mo+mo5oo=mo5j+mo5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2570. | mo+mo5oo=mo4j+mo5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2571. | mo+mo5oo=mo3j+mo5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2572. | mo+mo5oo=mo2j+mo5ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2573. | mo+mo5oo=mmomj+mo5ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2574. | mo+mo4oo=mo8j+mo4ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2575. | mo+mo4oo=mo7j+mo4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2576. | mo+mo4oo=mo6j+mo4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2577. | mo+mo4oo=mo5j+mo4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2578. | mo+mo4oo=mo4j+mo4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2579. | mo+mo4oo=mo3j+mo4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2580. | mo+mo4oo=mo2j+mo4ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2581. | mo+mo4oo=mmomj+mo4ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2582. | mo+mo3oo=mo8j+mo3ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2583. | mo+mo3oo=mo7j+mo3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2584. | mo+mo3oo=mo6j+mo3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2585. | mo+mo3oo=mo5j+mo3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2586. | mo+mo3oo=mo4j+mo3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2587. | mo+mo3oo=mo3j+mo3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2588. | mo+mo3oo=mo2j+mo3ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2589. | mo+mo3oo=mmomj+mo3ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2590. | mo+mo2oo=mo8j+mo2ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2591. | mo+mo2oo=mo7j+mo2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2592. | mo+mo2oo=mo6j+mo2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2593. | mo+mo2oo=mo5j+mo2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2594. | mo+mo2oo=mo4j+mo2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 2595. mo+mo2oo=mo3j+mo2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2596. mo+mo2oo=mo2j+mo2ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2597. mo+mo2oo=mmomj+mo2ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2598. mo+mmomoo=mo8j+mmomooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2599. mo+mmomoo=mo7j+mmomooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2600. mo+mmomoo=mo6j+mmomooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2601. mo+mmomoo=mo5j+mmomooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2602. mo+mmomoo=mo4j+mmomooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2603. mo+mmomoo=mo3j+mmomooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 2604. mo+mmomoo=mo2j+mmomooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 2605. mo+mmomoo=mmomj+mmomooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 2606. mo8j+o2=mo8oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2607. mo7j+o2=mo7oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2608. mo6j+o2=mo6oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2609. mo5j+o2=mo5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2610. mo4j+o2=mo4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2611. mo3j+o2=mo3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2612. mo2j+o2=mo2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 2613. mmomj+o2=mmomoo | 3.50E+11 | 0.0 | -1700.0 |
| 2614. mo8j=mo5j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 2615. mo8j=mo4j | 1.70E+07 | 1.0 | 12000.0 |
| 2616. mo8j=mo3j | 2.90E+06 | 1.0 | 17400.0 |
| 2617. mo7j=mo4j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 2618. mo7j=mo3j | 1.70E+07 | 1.0 | 12000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.70E+07 | 1.0 | 12000.0 |
| 2619. mo6j=mo3j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 2620. mo3j=mmomj | 2.50E+07 | 1.0 | 14500.0 |
| 2621. mo2j=mo7j | 2.90E+06 | 1.0 | 17400.0 |
| 2622. mo2j=mo6j | 1.70E+07 | 1.0 | 12000.0 |
| 2623. mo2j=mo5j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 2624. mo2j=mmomj | 1.50E+08 | 1.0 | 22800.0 |
| 2625. mmomj=mo4j | 2.90E+07 | 1.0 | 17400.0 |
| 2626. mo8j=c2h4+mhx6j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2627. mo7j=c3h6+mpe5j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2628. mo6j=c4h8+mb4j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2629. mo6j=ch3+mhp6d | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 2630. mo5j=c5h10+mp3j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2631. mo5j=c2h5+mhx5d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2632. mo4j=c6h12-1+me2j | 2.00E+13 | 0.0 | 24700.0 |
| 2633. mo4j=nc3h7+mpe4d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2634. mo3j=c7h14-1+ch3oco | 2.00E+13 | 0.0 | 30500.0 |
| 2635. mo3j=pc4h9+mb3d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2636. mo2j=Ac5h11+mp2d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2637. c7h14co+ch3o=mo2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 2638. mmomj=ch2o+c7h15co | 1.64E+22 | -2.3 | 31950.0 |
| 2639. co2+Ac7h15=oaoj | 1.00E+11 | 0.0 | 39360.0 |
| 2640. mo8j=h+mo7d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2641. mo7j=h+mo7d | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| 2642. mo7j=h+mo6d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2643. mo6j=h+mo6d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2644. mo6j=h+mo5d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2645. mo5j=h+mo5d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2646. mo5j=h+mo4d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2647. mo4j=h+mo4d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2648. mo4j=h+mo3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2649. mo3j=h+mo3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 2650. mo3j=h+mo2d | 3.20E+13 | 0.0 | 34800.0 |
| 2651. mo2j=h+mo2d | 3.00E+13 | 0.0 | 50500.0 |
| 2652. mo8j+o2=mo7d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2653. mo7j+o2=mo7d+ho2 | 8.07E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 2654. mo7j+o2=mo6d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2655. mo6j+o2=mo6d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2656. mo6j+o2=mo5d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2657. mo5j+o2=mo5d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2658. mo5j+o2=mo4d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2659. mo4j+o2=mo4d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2660. mo4j+o2=mo3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2661. mo3j+o2=mo3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2662. mo3j+o2=mo2d+ho2 | 2.60E+11 | 0.0 | 2500.0 |
| 2663. mo2j+o2=mo2d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 |
| 2664. ho2+mo8j=oh+mo8o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2665. ho2+mo7j=oh+mo7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2666. ho2+mo6j=oh+mo6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2667. ho2+mo5j=oh+mo5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2668. ho2+mo4j=oh+mo4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2669. ho2+mo3j=oh+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2670. ho2+mo2j=oh+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2671. ho2+mmomj=oh+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2672. ch3o2+mo8j=ch3o+mo8o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2673. ch3o2+mo7j=ch3o+mo7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2674. ch3o2+mo6j=ch3o+mo6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2675. ch3o2+mo5j=ch3o+mo5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2676. ch3o2+mo4j=ch3o+mo4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2677. ch3o2+mo3j=ch3o+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2678. ch3o2+mo2j=ch3o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2679. ch3o2+mmomj=ch3o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2680. mo8ooh=mo8o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2681. mo7ooh=mo7o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 2682. mo6ooh=mo6o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 2683. mo5ooh=mo5o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 2684. mo4ooh=mo4o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 2685. mo3ooh=mo3o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 2686. mo2ooh=mo2o+oh | 5.95E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| 2687. mmomooh=momo+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 2688. mo8oo=mo8ooh7j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2689. mo8oo=mo8ooh6j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2690. mo8oo=mo8ooh5j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 2691. mo8oo=mo8ooh4j | 1.72E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 2692. mo7oo=mo7ooh8j | 4.95E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 2693. mo7oo=mo7ooh6j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2694. mo7oo=mo7ooh5j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2695. mo7oo=mo7ooh4j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 2696. mo7oo=mo7ooh3j | 1.72E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 2697. mo6oo=mo6ooh8j | 8.55E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 2698. mo6oo=mo6ooh7j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2699. mo6oo=mo6ooh5j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2700. mo6oo=mo6ooh4j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2701. mo6oo=mo6ooh3j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 2702. mo6oo=mo6ooh2j | 1.72E+07 | 1.0 | 16000.0 |
| 2703. mo5oo=mo5ooh8j | 1.50E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2704. mo5oo=mo5ooh7j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2705. mo5oo=mo5ooh6j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2706. mo5oo=mo5ooh4j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2707. mo5oo=mo5ooh3j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2708. mo5oo=mo5ooh2j | 1.00E+08 | 1.0 | 17000.0 |
| 2709. mo4oo=mo4ooh8j | 1.72E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 2710. mo4oo=mo4ooh7j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 2711. mo4oo=mo4ooh6j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2712. mo4oo=mo4ooh5j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2713. mo4oo=mo4ooh3j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2714. | mo4oo=mo4ooh2j | 5.70E+08 | 1.0 | 18000.0 |
| 2715. | mo3oo=mo3ooh7j | 1.72E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 2716. | mo3oo=mo3ooh6j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 2717. | mo3oo=mo3ooh5j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2718. | mo3oo=mo3ooh4j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2719. | mo3oo=mo3ooh2j | 3.30E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 2720. | mo2oo=mo2ooh6j | 1.72E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 2721. | mo2oo=mo2ooh5j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 2722. | mo2oo=mo2ooh4j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2723. | mo2oo=mo2ooh3j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2724. | mo2oo=mo2oohmj | 1.50E+08 | 1.0 | 28500.0 |
| 2725. | mmomoo=mmomooh2j | 1.00E+08 | 1.0 | 21700.0 |
| 2726. | mo8oo+mo8oo=>mo8o+mo8o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2727. | mo8oo+mo7oo=>mo8o+mo7o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2728. | mo8oo+mo6oo=>mo8o+mo6o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2729. | mo8oo+mo5oo=>mo8o+mo5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2730. | mo8oo+mo4oo=>mo8o+mo4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2731. | mo8oo+mo3oo=>mo8o+mo3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2732. | mo8oo+mo2oo=>mo8o+mo2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2733. | mo8oo+mmomoo=>mo8o+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2734. | mo7oo+mo7oo=>mo7o+mo7o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2735. | mo7oo+mo6oo=>mo7o+mo6o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2736. | mo7oo+mo5oo=>mo7o+mo5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2737. | mo7oo+mo4oo=>mo7o+mo4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2738. | mo7oo+mo3oo=>mo7o+mo3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2739. | mo7oo+mo2oo=>mo7o+mo2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2740. | mo7oo+mmomoo=>mo7o+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2741. | mo6oo+mo6oo=>mo6o+mo6o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2742. | mo6oo+mo5oo=>mo6o+mo5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2743. | mo6oo+mo4oo=>mo6o+mo4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2744. | mo6oo+mo3oo=>mo6o+mo3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2745. | mo6oo+mo2oo=>mo6o+mo2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2746. | mo6oo+mmomoo=>mo6o+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2747. | mo5oo+mo5oo=>mo5o+mo5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2748. | mo5oo+mo4oo=>mo5o+mo4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2749. | mo5oo+mo3oo=>mo5o+mo3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2750. | mo5oo+mo2oo=>mo5o+mo2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2751. | mo5oo+mmomoo=>mo5o+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2752. | mo4oo+mo4oo=>mo4o+mo4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2753. | mo4oo+mo3oo=>mo4o+mo3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2754. | mo4oo+mo2oo=>mo4o+mo2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2755. | mo4oo+mmomoo=>mo4o+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2756. | mo3oo+mo3oo=>mo3o+mo3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2757. | mo3oo+mo2oo=>mo3o+mo2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2758. | mo3oo+mmomoo=>mo3o+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2759. | mo2oo+mo2oo=>mo2o+mo2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2760. | mo2oo+mmomoo=>mo2o+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2761. | mmomoo+mmomoo=>momo+momo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2762. | mo8oo+ch3o2=>mo8o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2763. | mo7oo+ch3o2=>mo7o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2764. | mo6oo+ch3o2=>mo6o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2765. | mo5oo+ch3o2=>mo5o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2766. | mo4oo+ch3o2=>mo4o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2767. | mo3oo+ch3o2=>mo3o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2768. | mo2oo+ch3o2=>mo2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2769. | mmomoo+ch3o2=>momo+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2770. | mo8oo+ho2=mo8ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2771. | mo7oo+ho2=mo7ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2772. | mo6oo+ho2=mo6ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2773. | mo5oo+ho2=mo5ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2774. | mo4oo+ho2=mo4ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2775. | mo3oo+ho2=mo3ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2776. | mo2oo+ho2=mo2ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2777. | mmomoo+ho2=mmomooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2778. | mo8oo+h2o2=mo8ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2779. | mo7oo+h2o2=mo7ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2780. | mo6oo+h2o2=mo6ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2781. | mo5oo+h2o2=mo5ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2782. | mo4oo+h2o2=mo4ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2783. | mo3oo+h2o2=mo3ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2784. | mo2oo+h2o2=mo2ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2785. | mmomoo+h2o2=mmomooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 2786. | mo8oo+mo8j=mo8o+mo8o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2787. | mo8oo+mo7j=mo8o+mo7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2788. | mo8oo+mo6j=mo8o+mo6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2789. | mo8oo+mo5j=mo8o+mo5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2790. | mo8oo+mo4j=mo8o+mo4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2791. | mo8oo+mo3j=mo8o+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2792. | mo8oo+mo2j=mo8o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2793. | mo8oo+mmomj=mo8o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2794. | mo7oo+mo7j=mo7o+mo7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2795. | mo7oo+mo6j=mo7o+mo6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2796. | mo7oo+mo5j=mo7o+mo5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2797. | mo7oo+mo4j=mo7o+mo4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2798. | mo7oo+mo3j=mo7o+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2799. | mo7oo+mo2j=mo7o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2800. | mo7oo+mmomj=mo7o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2801. | mo6oo+mo6j=mo6o+mo6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2802. | mo6oo+mo5j=mo6o+mo5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2803. | mo6oo+mo4j=mo6o+mo4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2804. | mo6oo+mo3j=mo6o+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2805. | mo6oo+mo2j=mo6o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2806. | mo6oo+mmomj=mo6o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2807. | mo5oo+mo5j=mo5o+mo5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2808. | mo5oo+mo4j=mo5o+mo4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2809. | mo5oo+mo3j=mo5o+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2810. | mo5oo+mo2j=mo5o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2811. | mo5oo+mmomj=mo5o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2812. | mo4oo+mo4j=mo4o+mo4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2813. | mo4oo+mo3j=mo4o+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2814. | mo4oo+mo2j=mo4o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2815. | mo4oo+mmomj=mo4o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2816. | mo3oo+mo3j=mo3o+mo3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2817. | mo3oo+mo2j=mo3o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2818. | mo3oo+mmomj=mo3o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2819. | mo2oo+mo2j=mo2o+mo2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2820. | mo2oo+mmomj=mo2o+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2821. | mmomoo+mmomj=momo+momo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2822. | mo8oo+ch3=mo8o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2823. | mo7oo+ch3=mo7o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2824. | mo6oo+ch3=mo6o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2825. | mo5oo+ch3=mo5o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2826. | mo4oo+ch3=mo4o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2827. | mo3oo+ch3=mo3o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2828. | mo2oo+ch3=mo2o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2829. | mmomoo+ch3=momo+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2830. | mo8ooh7j+o2=mo8ooh7oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2831. | mo8ooh6j+o2=mo8ooh6oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2832. | mo8ooh5j+o2=mo8ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2833. | mo8ooh4j+o2=mo8ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2834. | mo7ooh8j+o2=mo7ooh8oo | 1.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2835. | mo7ooh6j+o2=mo7ooh6oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2836. | mo7ooh5j+o2=mo7ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2837. | mo7ooh4j+o2=mo7ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2838. | mo7ooh3j+o2=mo7ooh3oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2839. | mo6ooh8j+o2=mo6ooh8oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2840. | mo6ooh5j+o2=mo6ooh5oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2841. | mo6ooh7j+o2=mo6ooh7oo | 9.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2842. | mo6ooh4j+o2=mo6ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2843. | mo6ooh3j+o2=mo6ooh3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2844. | mo6ooh2j+o2=mo6ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 2845. | mo5ooh8j+o2=mo5ooh8oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2846. | mo5ooh7j+o2=mo5ooh7oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2847. | mo5ooh6j+o2=mo5ooh6oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2848. | mo5ooh4j+o2=mo5ooh4oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2849. | mo5ooh3j+o2=mo5ooh3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2850. | mo5ooh2j+o2=mo5ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 2851. | mo4ooh8j+o2=mo4ooh8oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2852. | mo4ooh7j+o2=mo4ooh7oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2853. | mo4ooh6j+o2=mo4ooh6oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2854. | mo4ooh5j+o2=mo4ooh5oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2855. | mo4ooh3j+o2=mo4ooh3oo | 3.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2856. | mo4ooh2j+o2=mo4ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 2857. | mo3ooh7j+o2=mo3ooh7oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2858. | mo3ooh6j+o2=mo3ooh6oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2859. | mo3ooh5j+o2=mo3ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2860. | mo3ooh4j+o2=mo3ooh4oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2861. | mo3ooh2j+o2=mo3ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 2862. | mo2ooh6j+o2=mo2ooh6oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2863. | mo2ooh5j+o2=mo2ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2864. | mo2ooh4j+o2=mo2ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2865. | mo2ooh3j+o2=mo2ooh3oo | 1.00E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 2866. | mo2oohmj+o2=mo2oohmoo | 3.50E+11 | 0.0 | -1700.0 |
| 2867. | mmomooh2j+o2=mmomooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 2868. | mo7d+ho2=mo8ooh7j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2869. | mo7d+ho2=mo7ooh8j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2870. | mo6d+ho2=mo7ooh6j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2871. | mo6d+ho2=mo6ooh7j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2872. | mo5d+ho2=mo6ooh5j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2873. | mo5d+ho2=mo5ooh6j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2874. | mo4d+ho2=mo5ooh4j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2875. | mo4d+ho2=mo4ooh5j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2876. | mo3d+ho2=mo4ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2877. | mo3d+ho2=mo3ooh4j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2878. | mo2d+ho2=mo3ooh2j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2879. | mo2d+ho2=mo2ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 2880. | mo8ooh6j=>mhp6d+ch2o+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 2881. | mo8ooh5j=>mhx5d+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2882. | mo8ooh4j=>mpe4d+c3h6ooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2883. | mo7ooh5j=>mhx5d+ch3hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2884. | mo7ooh4j=>mpe4d+c3h6ooh2-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2885. | mo7ooh3j=>mb3d+c2h4+ch3hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2886. | mo6ooh8j=>mhx6*o+c2h4+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2887. | mo6ooh4j=>mpe4d+c2h5hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2888. | mo6ooh3j=>mb3d+c4h8+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2889. | mo6ooh2j=>mp2d+c2h4+c2h5hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2890. | mo5ooh8j=>mhx5ooh6j+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2891. | mo5ooh7j=>mpe5*o+c3h6+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2892. | mo5ooh3j=>mb3d+nc3h7hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2893. | mo5ooh2j=>mp2d+c5h10+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2894. | mo4ooh8j=>mhx4ooh6j+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2895. | mo4ooh7j=>mpe4d+c3h6+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2896. | mo4ooh6j=>mb4*o+c4h8+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2897. | mo4ooh2j=>mp2d+nc4h9hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2898. | mo3ooh7j=>mp3*o+oh+c2h4+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2899. | mo3ooh6j=>mb3ooh4j+c4h8 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2900. | mo3ooh5j=>mp3*o+c5h10+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2901. | mo2ooh6j=>mb2ooh4j+c4h8 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2902. | mo2ooh5j=>mp2d+c5h10+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2903. | mo2ooh4j=>me2*o+c6h12-1+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2904. | mo2oohmj=>ch2o+co+c6h13hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2905. | mmomooh2j=>ch2o+c7h14co+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 2906. | mo8ooh6j=>mocy8o6+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2907. | mo8ooh5j=>mocy8o5+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2908. | mo8ooh4j=>mocy8o4+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 2909. | mo7ooh5j=>mocy7o5+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 12600.0 |
| 2910. | mo7ooh4j=>mocy7o4+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2911. | mo7ooh3j=>mocy7o3+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 2912. | mo6ooh8j=>mocy8o6+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2913. | mo6ooh4j=>mocy6o4+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2914. | mo6ooh3j=>mocy6o3+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2915. | mo6ooh2j=>mocy6o2+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 2916. | mo5ooh8j=>mocy8o5+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2917. | mo5ooh7j=>mocy7o5+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2918. | mo5ooh3j=>mocy5o3+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2919. | mo5ooh2j=>mocy5o2+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2920. | mo4ooh8j=>mocy8o4+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 2921. | mo4ooh7j=>mocy7o4+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2922. | mo4ooh6j=>mocy6o4+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2923. | mo4ooh2j=>mocy4o2+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2924. | mo3ooh7j=>mocy7o3+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 2925. | mo3ooh6j=>mocy6o3+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2926. | mo3ooh5j=>mocy5o3+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2927. | mo2ooh6j=>mocy6o2+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 2928. | mo2ooh5j=>mocy5o2+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2929. | mo2ooh4j=>mocy4o2+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 2930. | mo2oohmj=>mocy2om+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2931. | mmomooh2j=>mocy2om+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 2932. | mo8ooh7oo=mo7ooh8oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 2933. | mo7ooh6oo=mo6ooh7oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 2934. | mo6ooh5oo=mo5ooh6oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 2935. | mo5ooh4oo=mo4ooh5oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 2936. | mo4ooh3oo=mo3ooh4oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 2937. | mo3ooh2oo=mo2ooh3oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 2938. | mo8ooh7oo=>mo7ooh8*o+oh | 3.30E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 2939. | mo8ooh6oo=>mo6ooh8*o+oh | 5.70E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 2940. | mo8ooh5oo=>mo5ooh8*o+oh | 1.00E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2941. | mo8ooh4oo=>mo4ooh8*o+oh | 1.70E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 2942. | mo7ooh8oo=>mo8ooh7*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2943. | mo7ooh6oo=>mo6ooh7*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 2944. | mo7ooh5oo=>mo5ooh7*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2945. | mo7ooh4oo=>mo4ooh7*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 2946. | mo7ooh3oo=>mo3ooh7*o+oh | 8.60E+06 | 1.0 | 21000.0 |
| 2947. | mo6ooh8oo=>mo8ooh6*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2948. | mo6ooh7oo=>mo7ooh6*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2949. | mo6ooh5oo=>mo5ooh6*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2950. | mo6ooh4oo=>mo4ooh6*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2951. | mo6ooh3oo=>mo3ooh6*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 2952. | mo6ooh2oo=>mo2ooh6*o+oh | 8.60E+06 | 1.0 | 21000.0 |
| 2953. | mo5ooh8oo=>mo8ooh5*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 2954. | mo5ooh7oo=>mo7ooh5*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2955. | mo5ooh6oo=>mo6ooh5*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2956. | mo5ooh4oo=>mo4ooh5*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2957. | mo5ooh3oo=>mo3ooh5*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2958. | mo5ooh2oo=>mo2ooh5*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 2959. | mo3ooh7oo=>mo7ooh3*o+oh | 8.60E+06 | 1.0 | 21000.0 |
| 2960. | mo4ooh7oo=>mo7ooh4*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 2961. | mo4ooh6oo=>mo6ooh4*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2962. | mo4ooh5oo=>mo5ooh4*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2963. | mo4ooh3oo=>mo3ooh4*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2964. | mo4ooh2oo=>mo2ooh4*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2965. | mo3ooh6oo=>mo6ooh3*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 2966. | mo3ooh5oo=>mo5ooh3*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 2967. | mo3ooh4oo=>mo4ooh3*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2968. | mo3ooh2oo=>mo2ooh3*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 2969. | mo2ooh6oo=>mo6ooh2*o+oh | 8.50E+06 | 1.0 | 16000.0 |
| 2970. | mo2ooh5oo=>mo5ooh2*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 17000.0 |
| 2971. | mo2ooh4oo=>mo4ooh2*o+oh | 2.85E+07 | 1.0 | 20000.0 |
| 2972. | mo2ooh3oo=>mo3ooh2*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 2973. | mo2oohmoo=>mmomooh2*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 21700.0 |
| 2974. | mmomooh2oo=>mo2oohm*o+oh | 1.00E+08 | 1.0 | 28500.0 |
| 2975. | ch2o+mhp7j=mo8o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2976. | ch3hco+mhx6j=mo7o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2977. | ch3+mhp7*o=mo7o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2978. | c2h5hco+mpe5j=mo6o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2979. | c2h5+mhx6*o=mo6o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2980. | nc3h7hco+mb4j=mo5o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2981. | nc3h7+mpe5*o=mo5o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2982. | nc4h9hco+mp3j=mo4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2983. | pc4h9+mb4*o=mo4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2984. | c5h11hco+me2j=mo3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2985. | Ac5h11+mp3*o=mo3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2986. | c6h13hco+ch3oco=mo2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2987. | Ac6h13+me2*o=mo2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2988. | ch2o+oaoj=momo | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 2989. | mo8*o+h=mo8o | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 2990. | mmom*o+h=momo | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 2991. | mocy8o6+h=>mhx6j*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 2992. | mocy8o6+h=>mhp6d+hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 2993. | mocy8o5+h=>mhx6j5*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 2994. | mocy8o5+h=>mhx5d+ch2hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 2995. | mocy8o4+h=>mhx6j4*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 2996. | mocy8o4+h=>mpe4d+ch2ch2hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 2997. | mocy7o5+h=>mpe5j*o+c3h6+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 2998. | mocy7o5+h=>mhx5d+ch3co+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 2999. | mocy7o4+h=>mpe5j4*o+c3h6+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3000. | mocy7o4+h=>mpe4d+ch2coch3+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3001. | mocy7o3+h=>mpe5j3*o+c3h6+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3002. | mocy7o3+h=>mb3d+ch3coc2h4p+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3003. | mocy6o4+h=>mb4j*o+c4h8+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3004. | mocy6o4+h=>mpe4d+c2h5co+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3005. | mocy6o3+h=>mb4j3*o+c4h8+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3006. | mocy6o3+h=>mb3d+c2h5coch2+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3007. | mocy6o2+h=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3008. | mocy5o3+h=>mp3j*o+c5h10+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3009. | mocy5o3+h=>mb3d+nc3h7co+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3010. | mocy5o2+h=>mp2d+c3h7coch2+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3011. | mocy4o2+h=>mp2d+nc4h9co+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3012. | mocy2om+h=>c7h14co+ocho+h2 | 1.92E+09 | 1.5 | 2785.0 |
| 3013. | mocy8o6+oh=>mhx6j*o+c2h4+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3014. | mocy8o6+oh=>mhp6d+hco+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3015. | mocy8o5+oh=>mhx6j5*o+c2h4+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3016. | mocy8o5+oh=>mhx5d+ch2hco+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3017. | mocy8o4+oh=>mhx6j4*o+c2h4+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3018. | mocy8o4+oh=>mpe4d+ch2ch2hco+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3019. | mocy7o5+oh=>mpe5j*o+c3h6+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3020. | mocy7o5+oh=>mhx5d+ch3co+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3021. | mocy7o4+oh=>mpe5j4*o+c3h6+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3022. | mocy7o4+oh=>mpe4d+ch2coch3+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3023. | mocy7o3+oh=>mpe5j3*o+c3h6+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3024. | mocy7o3+oh=>mb3d+ch3coc2h4p+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3025. | mocy6o4+oh=>mb4j*o+c4h8+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3026. | mocy6o4+oh=>mpe4d+c2h5co+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3027. | mocy6o3+oh=>mb4j3*o+c4h8+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3028. | mocy6o3+oh=>mb3d+c2h5coch2+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3029. | mocy6o2+oh=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3030. | mocy5o3+oh=>mp3j*o+c5h10+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3031. | mocy5o3+oh=>mb3d+nc3h7co+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3032. | mocy5o2+oh=>mp2d+c3h7coch2+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3033. | mocy4o2+oh=>mp2d+nc4h9co+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3034. | mocy2om+oh=>c7h14co+ocho+h2o | 9.60E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3035. | mocy8o6+ho2=>mhx6j*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3036. | mocy8o6+ho2=>mhp6d+hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 3037. | mocy8o5+ho2=>mhx6j5*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3038. | mocy8o5+ho2=>mhx5d+ch2hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 3039. | mocy8o4+ho2=>mhx6j4*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3040. | mocy8o4+ho2=>mpe4d+ch2ch2hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 3041. | mocy7o5+ho2=>mpe5j*o+c3h6+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3042. | mocy7o5+ho2=>mhx5d+ch3co+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3043. | mocy7o4+ho2=>mpe5j4*o+c3h6+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3044. | mocy7o4+ho2=>mpe4d+ch2coch3+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3045. | mocy7o3+ho2=>mpe5j3*o+c3h6+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3046. | mocy7o3+ho2=>mb3d+ch3coc2h4p+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3047. | mocy6o4+ho2=>mb4j*o+c4h8+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3048. | mocy6o4+ho2=>mpe4d+c2h5co+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3049. | mocy6o3+ho2=>mb4j3*o+c4h8+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3050. | mocy6o3+ho2=>mb3d+c2h5coch2+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3051. | mocy6o2+ho2=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3052. | mocy5o3+ho2=>mp3j*o+c5h10+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3053. | mocy5o3+ho2=>mb3d+nc3h7co+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3054. | mocy5o2+ho2=>mp2d+c3h7coch2+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3055. | mocy4o2+ho2=>mp2d+nc4h9co+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3056. | mocy2om+ho2=>c7h14co+ocho+h2o2 | 1.60E+13 | 0.0 | 14400.0 |
| 3057. | mocy8o6+ch3o=>mhx6j*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3058. | mocy8o6+ch3o=>mhp6d+hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3059. | mocy8o5+ch3o=>mhx6j5*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3060. | mocy8o5+ch3o=>mhx5d+ch2hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3061. | mocy8o4+ch3o=>mhx6j4*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3062. | mocy8o4+ch3o=>mpe4d+ch2ch2hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3063. | mocy7o5+ch3o=>mpe5j*o+c3h6+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3064. | mocy7o5+ch3o=>mhx5d+ch3co+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3065. | mocy7o4+ch3o=>mpe5j4*o+c3h6+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 3066. | mocy7o4+ch3o=>mpe4d+ch2coch3+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3067. | mocy7o3+ch3o=>mpe5j3*o+c3h6+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3068. | mocy7o3+ch3o=>mb3d+ch3coc2h4p+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3069. | mocy6o4+ch3o=>mb4j*o+c4h8+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3070. | mocy6o4+ch3o=>mpe4d+c2h5co+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3071. | mocy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c4h8+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3072. | mocy6o3+ch3o=>mb3d+c2h5coch2+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3073. | mocy6o2+ch3o=>mp2d+c2h5coc2h4p+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3074. | mocy5o3+ch3o=>mp3j*o+c5h10+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3075. | mocy5o3+ch3o=>mb3d+nc3h7co+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3076. | mocy5o2+ch3o=>mp2d+c3h7coch2+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3077. | mocy4o2+ch3o=>mp2d+nc4h9co+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3078. | mocy2om+ch3o=>c7h14co+ocho+ch3oh | 8.76E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3079. | mocy8o6+ch3o2=>mhx6j*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3080. | mocy8o6+ch3o2=>mhp6d+hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3081. | mocy8o5+ch3o2=>mhx6j5*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3082. | mocy8o5+ch3o2=>mhx5d+ch2hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3083. | mocy8o4+ch3o2=>mhx6j4*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3084. | mocy8o4+ch3o2=>mpe4d+ch2ch2hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3085. | mocy7o5+ch3o2=>mpe5j*o+c3h6+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3086. | mocy7o5+ch3o2=>mhx5d+ch3co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3087. | mocy7o4+ch3o2=>mpe5j4*o+c3h6+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3088. | mocy7o4+ch3o2=>mpe4d+ch2coch3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3089. | mocy7o3+ch3o2=>mpe5j3*o+c3h6+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3090. | mocy7o3+ch3o2=>mb3d+ch3coc2h4p+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3091. | mocy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c4h8+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3092. | mocy6o4+ch3o2=>mpe4d+c2h5co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3093. | mocy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c4h8+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3094. | mocy6o3+ch3o2=>mb3d+c2h5coch2+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3095. | mocy6o2+ch3o2=>mp2d+c2h5coc2h4p+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3096. | mocy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c5h10+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3097. | mocy5o3+ch3o2=>mb3d+nc3h7co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3098. | mocy5o2+ch3o2=>mp2d+c3h7coch2+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3099. | mocy4o2+ch3o2=>mp2d+nc4h9co+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3100. | mocy2om+ch3o2=>c7h14co+ocho+ch3o2h | 1.60E+13 | 0.0 | 17700.0 |
| 3101. | mo7ooh8*o=>mhp7*o+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3102. | mo6ooh8*o=>mhx6*o+ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3103. | mo5ooh8*o=>mpe5*o+ch2ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3104. | mo5ooh8*o=>mb4j+choc2h4cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3105. | mo4ooh8*o=>mb4*o+c3h6hco-1+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3106. | mo4ooh8*o=>mp3j+choc3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3107. | mo8ooh7*o=>mhp7j*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3108. | mo6ooh7*o=>mhx6*o+ch3co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3109. | mo5ooh7*o=>mpe5*o+ch2coch3+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3110. | mo5ooh7*o=>mb4j+c4ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3111. | mo4ooh7*o=>mb4*o+ch3coc2h4p+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3112. | mo4ooh7*o=>mp3j+c5ald4oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3113. | mo3ooh7*o=>me2j+c6ald5oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3114. | mo8ooh6*o=>mhp7j6*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3115. | mo7ooh6*o=>mhx6j*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3116. | mo5ooh6*o=>mpe5*o+c2h5co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3117. | mo4ooh6*o=>mb4*o+c2h5coch2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3118. | mo4ooh6*o=>mp3j+c5ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3119. | mo3ooh6*o=>mp3*o+c2h5coc2h4p+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3120. | mo3ooh6*o=>me2j+c6ald4oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3121. | mo2ooh6*o=>ch3oco+c7ald4oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3122. | mo8ooh5*o=>mhp7j5*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3123. | mo7ooh5*o=>mhx6j5*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3124. | mo6ooh5*o=>mpe5j*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3125. | mo4ooh5*o=>mb4*o+nc3h7co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3126. | mo3ooh5*o=>mp3*o+c3h7coch2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3127. | mo3ooh5*o=>me2j+c6ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3128. | mo2ooh5*o=>ch3oco+c7ald4oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3129. | mo7ooh4*o=>mhx6j4*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3130. | mo6ooh4*o=>mpe5j4*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3131. | mo5ooh4*o=>mb4j*o+nc3h7hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3132. | mo3ooh4*o=>mp3*o+nc4h9co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3133. | mo2ooh4*o=>ch3oco+c7ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3134. | mo7ooh3*o=>mhx6j3*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3135. | mo6ooh3*o=>mpe5j3*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3136. | mo5ooh3*o=>mb4j3*o+nc3h7hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3137. | mo4ooh3*o=>mp3j*o+nc4h9hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3138. | mo2ooh3*o=>ch3oco+c5h11cocho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3139. | mo6ooh2*o=>mpe5j2*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3140. | mo5ooh2*o=>mb4j2*o+nc3h7hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3141. | mo4ooh2*o=>mp3j2*o+nc4h9hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3142. | mo3ooh2*o=>me2j*o+c5h11hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3143. | mmomooh2*o=>oaoj2*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3144. | mo2oohm*o=>chooco+c6h13hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3145. | mo7d+o=mo7d6j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3146. | mo7d+o=mo7d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3147. | mo7d+h=mo7d6j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3148. | mo7d+h=mo7d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3149. | mo7d+oh=mo7d6j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3150. | mo7d+oh=mo7d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3151. | mo7d+ho2=mo7d6j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3152. | mo7d+ho2=mo7d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3153. | mo7d+ch3o=mo7d6j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 12000.0 |
| 3154. | mo7d+ch3o=mo7d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 12000.0 |
| 3155. | mo7d=me2j+Fc6h11-1 | 2.50E+16 | 0.0 | 68000.0 |
| 3156. | mo7d=mp3j+Ec5h9-1 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 3157. | mo7d=mb4j+Cc4h7-1 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 3158. | mo7d=mpe5j+ac3h5 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 3159. | c2h3+mhx6j=mo7d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3160. | mo7d+o2=mo7d6j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3161. | mo7d+o2=mo7d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3162. | mo7d+o=mhp7j+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3163. | mo7d6j+h=mo7d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3164. | mo7d6j=c4h6+mb4j | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3165. | mo7d2j=Ec5h9-1+mp2d | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3166. | c7h12co+ch3o=mo7d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3167. | mo6d+o=mo7d6j+oh | 1.74E+11 | 0.7 | 5900.0 |
| 3168. | mo6d+o=mo6d5j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3169. | mo6d+o=mo6d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3170. | mo6d+h=mo7d6j+h2 | 1.74E+05 | 2.5 | 2510.0 |
| 3171. | mo6d+h=mo6d5j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3172. | mo6d+h=mo6d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3173. | mo6d+oh=mo7d6j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -298.0 |
| 3174. | mo6d+oh=mo6d5j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3175. | mo6d+oh=mo6d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3176. | mo6d+ho2=mo7d6j+h2o2 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 |
| 3177. | mo6d+ho2=mo6d5j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3178. | mo6d+ho2=mo6d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3179. | mo6d+ch3o=mo7d6j+ch3oh | 1.98E+12 | 0.0 | 4000.0 |
| 3180. | mo6d+ch3o=mo6d5j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3181. | mo6d+ch3o=mo6d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3182. | mo6d+o2=mo6d5j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3183. | mo6d+o2=mo7d6j+ho2 | 6.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3184. | mo6d+o2=mo6d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3185. | mo6d5j+h=mo6d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3186. | mo6d+o=mhx6j+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3187. | mo6d5j=c5h8-13+mp3j | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 3188. | mo6d2j=Cc5h9-1+mp2d | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3189. | c7h12co+ch3o=mo6d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3190. | mo5d+o=mo6d5j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3191. | mo5d+o=mo5d4j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3192. | mo5d+o=mo5d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3193. | mo5d+h=mo6d5j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3194. | mo5d+h=mo5d4j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3195. | mo5d+h=mo5d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3196. | mo5d+oh=mo6d5j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3197. | mo5d+oh=mo5d4j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3198. | mo5d+oh=mo5d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3199. | mo5d+ho2=mo6d5j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3200. | mo5d+ho2=mo5d4j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3201. | mo5d+ho2=mo5d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3202. | mo5d+ch3o=mo6d5j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3203. | mo5d+ch3o=mo5d4j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3204. | mo5d+ch3o=mo5d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3205. | mo5d+o2=mo6d5j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3206. | mo5d+o2=mo5d4j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3207. | mo5d+o2=mo5d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3208. | mo5d+o=mpe5j+c2h5co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3209. | mo5d4j+h=mo5d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3210. | mo5d4j=c6h10-13+me2j | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3211. | mo5d4j=mhp6d4d+ch3 | 1.30E+13 | 0.0 | 38200.0 |
| 3212. | mo5d2j=Cc5h9-1+mp2d | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3213. | c7h12co+ch3o=mo5d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3214. | mo4d+o=mo5d4j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3215. | mo4d+o=mo4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3216. | mo4d+o=mo4d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3217. | mo4d+h=mo5d4j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3218. | mo4d+h=mo4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3219. | mo4d+h=mo4d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3220. | mo4d+oh=mo5d4j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3221. | mo4d+oh=mo4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3222. | mo4d+oh=mo4d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3223. | mo4d+ho2=mo5d4j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3224. | mo4d+ho2=mo4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3225. | mo4d+ho2=mo4d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3226. | mo4d+ch3o=mo5d4j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3227. | mo4d+ch3o=mo4d3j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3228. | mo4d+ch3o=mo4d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3229. | mo4d+o2=mo4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3230. | mo4d+o2=mo5d4j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3231. | mo4d+o2=mo4d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3232. | mo4d+o=mb4j+nc3h7co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3233. | mo4d3j+h=mo4d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3234. | mo4d3j=c7h12-13+ch3oco | 1.30E+13 | 0.0 | 33900.0 |
| 3235. | mo4d3j=mhx5d3d+c2h5 | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3236. | mo4d2j=mp2d+Ec5h9-1 | 1.30E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| 3237. | c7h12co+ch3o=mo4d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3238. | mo3d+o=mo4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3239. | mo3d+o=mo3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3240. | mo3d+h=mo4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3241. | mo3d+h=mo3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3242. | mo3d+oh=mo4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3243. | mo3d+oh=mo3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3244. | mo3d+ho2=mo4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3245. | mo3d+ho2=mo3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3246. | mo3d+ch3o=mo4d3j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3247. | mo3d+ch3o=mo3d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3248. | mo3d+o2=mo4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3249. | mo3d+o2=mo3d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3250. | mo3d+o=mp3j+nc4h9co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3251. | mo3d2j+h=mo3d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3252. | c7h12co+ch3o=mo3d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3253. | mo3d2j=mpe4d2d+nc3h7 | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3254. | mo2d+o=mo3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3255. | mo2d+h=mo3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3256. | mo2d+oh=mo3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3257. | mo2d+ho2=mo3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3258. | mo2d+ch3o=mo3d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3259. | mo2d+o2=mo3d2j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3260. | mo2d+o=me2j+c5h11co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3261. | mo7d+oh=mo7oh8j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3262. | mo6d+oh=mo6oh7j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3263. | mo5d+oh=mo5oh6j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3264. | mo4d+oh=mo4oh5j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3265. | mo3d+oh=mo3oh4j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3266. | mo2d+oh=mo2oh3j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3267. | mo7oh8j+o2=mo7oh8oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3268. | mo6oh7j+o2=mo6oh7oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3269. | mo5oh6j+o2=mo5oh6oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3270. | mo4oh5j+o2=mo4oh5oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3271. | mo3oh4j+o2=mo3oh4oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3272. | mo2oh3j+o2=mo2oh3oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3273. | mo7oh8oo=>mhp7*o+oh+ch2o | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3274. | mo6oh7oo=>mhx6*o+oh+ch3hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3275. | mo5oh6oo=>mpe5*o+oh+c2h5hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3276. | mo4oh5oo=>mb4*o+oh+nc3h7hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3277. | mo3oh4oo=>mp3*o+oh+nc4h9hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3278. | mo2oh3oo=>me2*o+oh+c5h11hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3279. | hco+mhp7j=mo8*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3280. | mo8*o+o2=mo8j*o+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 3281. | mo8*o+h=mo8j*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 3282. | mo8*o+oh=mo8j*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 3283. | mo8*o+o=mo8j*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 3284. | mo8*o+ho2=mo8j*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 3285. | mo8j*o=mhp7j+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 3286. | mmom*o+o2=mmomj*o+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 3287. | mmom*o+h=mmomj*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 3288. | mmom*o+oh=mmomj*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 3289. | mmom*o+o=mmomj*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 3290. | mmom*o+ho2=mmomj*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 3291. | mmomj*o=oaoj+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 3292. | mhp=mhp7j+h | 7.90E+15 | 0.0 | 97970.0 |
| 3293. | mhp=mhp6j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 3294. | mhp=mhp5j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 3295. | mhp=mhp4j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 3296. | mhp=mhp3j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 3297. | mhp2j+h=mhp | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 3298. | mhp=mhpmj+h | 7.90E+15 | 0.0 | 93970.0 |
| 3299. | mhp=mhx6j+ch3 | 5.00E+16 | 0.0 | 84660.0 |
| 3300. | mhp=mpe5j+c2h5 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 3301. | mhp=mb4j+nc3h7 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 3302. | mhp=mp3j+pc4h9 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 3303. | mhp=me2j+Ac5h11 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 3304. | mhp=ch3oco+Ac6h13 | 1.13E+16 | 0.0 | 77700.0 |
| 3305. | c6h13co+ch3o=mhp | 1.50E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3306. | mhp=hpaoj+ch3 | 3.16E+16 | 0.0 | 83070.0 |
| 3307. | mhp+o2=mhp7j+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 3308. | mhp+o2=mhp6j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 3309. | mhp+o2=mhp5j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 3310. mhp+o2=mhp4j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 3311. mhp+o2=mhp3j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 3312. mhp+o2=mhp2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3313. mhp+o2=mhpmj+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 44910.0 |
| 3314. mhp+h=mhp7j+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| 3315. mhp+h=mhp6j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 3316. mhp+h=mhp5j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 3317. mhp+h=mhp4j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 3318. mhp+h=mhp3j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 3319. mhp+h=mhp2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3320. mhp+h=mhpmj+h2 | 1.44E+13 | 0.0 | 6095.0 |
| 3321. mhp+o=mhp7j+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 3322. mhp+o=mhp6j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 21063.0 |
| 3323. mhp+o=mhp5j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 3324. mhp+o=mhp4j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 3325. mhp+o=mhp3j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 3326. mhp+o=mhp2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3327. mhp+o=mhpmj+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 3328. mhp+oh=mhp7j+h2o | 5.25E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| 3329. mhp+oh=mhp6j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 3330. mhp+oh=mhp5j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 3331. mhp+oh=mhp4j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 3332. mhp+oh=mhp3j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 3333. mhp+oh=mhp2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3334. mhp+oh=mhpmj+h2o | 7.10E+06 | 1.8 | -596.0 |
| 3335. mhp+ho2=mhp7j+h2o2 | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3336. mhp+ho2=mhp6j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3337. mhp+ho2=mhp5j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3338. mhp+ho2=mhp4j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3339. mhp+ho2=mhp3j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3340. mhp+ho2=mhp2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3341. mhp+ho2=mhpmj+h2o2 | 9.64E+10 | 0.0 | 12580.0 |
| 3342. mhp+hco=mhp7j+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 3343. mhp+hco=mhp6j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 3344. mhp+hco=mhp5j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 3345. mhp+hco=mhp4j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 3346. mhp+hco=mhp3j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 3347. mhp+hco=mhp2j+ch2o | 1.14E+09 | 1.3 | 15500.0 |
| 3348. mhp+hco=mhpmj+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 3349. mhp+ch3=mhp7j+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 3350. mhp+ch3=mhp6j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 3351. mhp+ch3=mhp5j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 3352. mhp+ch3=mhp4j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 3353. mhp+ch3=mhp3j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 3354. mhp+ch3=mhp2j+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 3355. mhp+ch3=mhpmj+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 3356. mhp+ch3o=mhp7j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 3357. mhp+ch3o=mhp6j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3358. mhp+ch3o=mhp5j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3359. mhp+ch3o=mhp4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3360. mhp+ch3o=mhp3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3361. mhp+ch3o=mhp2j+ch3oh | 1.78E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3362. mhp+ch3o=mhpmj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 3363. mhp+ch2oh=mhp7j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 3364. mhp+ch2oh=mhp6j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3365. mhp+ch2oh=mhp5j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3366. mhp+ch2oh=mhp4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3367. mhp+ch2oh=mhp3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3368. mhp+ch2oh=mhp2j+ch3oh | 3.60E+01 | 3.0 | 10000.0 |
| 3369. mhp+ch2oh=mhpmj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 3370. mhp+ch3o2=mhp7j+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3371. mhp+ch3o2=mhp6j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3372. mhp+ch3o2=mhp5j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3373. mhp+ch3o2=mhp4j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3374. mhp+ch3o2=mhp3j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3375. mhp+ch3o2=mhp2j+ch3o2h | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3376. mhp+ch3o2=mhpmj+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3377. mhp+c2h3=mhp7j+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 3378. mhp+c2h3=mhp6j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 3379. mhp+c2h3=mhp5j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 3380. mhp+c2h3=mhp4j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 3381. mhp+c2h3=mhp3j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 3382. mhp+c2h3=mhp2j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| 3383. mhp+c2h3=mhpmj+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 3384. mhp+c2h5=mhp7j+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 3385. mhp+c2h5=mhp6j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 3386. mhp+c2h5=mhp5j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 3387. mhp+c2h5=mhp4j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 3388. mhp+c2h5=mhp3j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 3389. mhp+c2h5=mhp2j+c2h6 | 2.20E+00 | 3.5 | 4140.0 |
| 3390. mhp+c2h5=mhpmj+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 3391. mhp+ac3h5=mhp7j+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 3392. mhp+ac3h5=mhp6j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3393. mhp+ac3h5=mhp5j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3394. mhp+ac3h5=mhp4j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3395. mhp+ac3h5=mhp3j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3396. mhp+ac3h5=mhp2j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 17170.0 |
| 3397. mhp+ac3h5=mhpmj+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 3398. mhp+mhp2j=mhp7j+mhp | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 3399. mhp+mhp2j=mhp6j+mhp | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3400. mhp+mhp2j=mhp5j+mhp | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3401. mhp+mhp2j=mhp4j+mhp | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3402. mhp+mhp2j=mhp3j+mhp | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 3403. mhp+mhp2j=mhpmj+mhp | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 3404. mhp+mhp7oo=mhp7j+mhp7ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3405. mhp+mhp7oo=mhp6j+mhp7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3406. mhp+mhp7oo=mhp5j+mhp7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3407. mhp+mhp7oo=mhp4j+mhp7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3408. mhp+mhp7oo=mhp3j+mhp7ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3409. mhp+mhp7oo=mhp2j+mhp7ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 3410. mhp+mhp7oo=mhpmj+mhp7ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3411. mhp+mhp6oo=mhp7j+mhp6ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3412. mhp+mhp6oo=mhp6j+mhp6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3413. mhp+mhp6oo=mhp5j+mhp6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3414. mhp+mhp6oo=mhp4j+mhp6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3415. mhp+mhp6oo=mhp3j+mhp6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3416. mhp+mhp6oo=mhp2j+mhp6ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 3417. mhp+mhp6oo=mhpmj+mhp6ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3418. mhp+mhp5oo=mhp7j+mhp5ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3419. mhp+mhp5oo=mhp6j+mhp5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3420. mhp+mhp5oo=mhp5j+mhp5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3421. mhp+mhp5oo=mhp4j+mhp5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3422. mhp+mhp5oo=mhp3j+mhp5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3423. mhp+mhp5oo=mhp2j+mhp5ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 3424. mhp+mhp5oo=mhpmj+mhp5ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3425. mhp+mhp4oo=mhp7j+mhp4ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3426. mhp+mhp4oo=mhp6j+mhp4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3427. mhp+mhp4oo=mhp5j+mhp4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3428. mhp+mhp4oo=mhp4j+mhp4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3429. mhp+mhp4oo=mhp3j+mhp4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3430. mhp+mhp4oo=mhp2j+mhp4ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 3431. mhp+mhp4oo=mhpmj+mhp4ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 3432. | mhp+mhp3oo=mhp7j+mhp3ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3433. | mhp+mhp3oo=mhp6j+mhp3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3434. | mhp+mhp3oo=mhp5j+mhp3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3435. | mhp+mhp3oo=mhp4j+mhp3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3436. | mhp+mhp3oo=mhp3j+mhp3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3437. | mhp+mhp3oo=mhp2j+mhp3ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 3438. | mhp+mhp3oo=mhpmj+mhp3ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3439. | mhp+mhp2oo=mhp7j+mhp2ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3440. | mhp+mhp2oo=mhp6j+mhp2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3441. | mhp+mhp2oo=mhp5j+mhp2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3442. | mhp+mhp2oo=mhp4j+mhp2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3443. | mhp+mhp2oo=mhp3j+mhp2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3444. | mhp+mhp2oo=mhp2j+mhp2ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 3445. | mhp+mhp2oo=mhpmj+mhp2ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3446. | mhp+mhpmoo=mhp7j+mhpmooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3447. | mhp+mhpmoo=mhp6j+mhpmooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3448. | mhp+mhpmoo=mhp5j+mhpmooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3449. | mhp+mhpmoo=mhp4j+mhpmooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3450. | mhp+mhpmoo=mhp3j+mhpmooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 3451. | mhp+mhpmoo=mhp2j+mhpmooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 3452. | mhp+mhpmoo=mhpmj+mhpmooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 3453. | mhp7j+o2=mhp7oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3454. | mhp6j+o2=mhp6oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3455. | mhp5j+o2=mhp5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3456. | mhp4j+o2=mhp4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3457. | mhp3j+o2=mhp3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3458. | mhp2j+o2=mhp2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 3459. | mhpmj+o2=mhpmoo | 3.50E+11 | 0.0 | -1700.0 |
| 3460. | mhp7j=mhp4j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 3461. | mhp7j=mhp3j | 1.70E+07 | 1.0 | 12000.0 |
| 3462. | mhp6j=mhp3j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 3463. | mhp3j=mhpmj | 2.50E+07 | 1.0 | 14500.0 |
| 3464. | mhp2j=mhp7j | 4.40E+06 | 1.0 | 19900.0 |
| 3465. | mhp2j=mhp6j | 1.70E+07 | 1.0 | 12000.0 |
| 3466. | mhp2j=mhp5j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 3467. | mhp2j=mhpmj | 1.50E+08 | 1.0 | 22800.0 |
| 3468. | mhpmj=mhp4j | 2.90E+06 | 1.0 | 17400.0 |
| 3469. | mhp7j=c2h4+mpe5j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3470. | mhp6j=c3h6+mb4j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3471. | mhp5j=c4h8+mp3j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3472. | mhp5j=ch3+mhx5d | 1.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 3473. | mhp4j=c5h10+me2j | 2.00E+13 | 0.0 | 24700.0 |
| 3474. | mhp4j=c2h5+mpe4d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3475. | mhp3j=c6h12-1+ch3oco | 2.00E+13 | 0.0 | 30500.0 |
| 3476. | mhp3j=nc3h7+mb3d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3477. | mhp2j=pc4h9+mp2d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3478. | c6h12co+ch3o=mhp2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3479. | mhpmj=ch2o+c6h13co | 1.64E+22 | -2.3 | 31950.0 |
| 3480. | co2+Ac6h13=hpaoj | 1.00E+11 | 0.0 | 39360.0 |
| 3481. | mhp7j=h+mhp6d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3482. | mhp6j=h+mhp6d | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| 3483. | mhp6j=h+mhp5d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3484. | mhp5j=h+mhp5d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3485. | mhp5j=h+mhp4d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3486. | mhp4j=h+mhp4d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3487. | mhp4j=h+mhp3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3488. | mhp3j=h+mhp3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 3489. | mhp3j=h+mhp2d | 3.20E+13 | 0.0 | 34800.0 |
| 3490. | mhp2j=h+mhp2d | 3.00E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| 3491. | mhp7j+o2=mhp6d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3492. | mhp6j+o2=mhp6d+ho2 | 8.07E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3493. | mhp6j+o2=mhp5d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3494. | mhp5j+o2=mhp5d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3495. | mhp5j+o2=mhp4d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3496. | mhp4j+o2=mhp4d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3497. | mhp4j+o2=mhp3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3498. | mhp3j+o2=mhp3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3499. | mhp3j+o2=mhp2d+ho2 | 2.60E+11 | 0.0 | 2500.0 |
| 3500. | mhp2j+o2=mhp2d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 |
| 3501. | ho2+mhp7j=oh+mhp7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3502. | ho2+mhp6j=oh+mhp6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3503. | ho2+mhp5j=oh+mhp5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3504. | ho2+mhp4j=oh+mhp4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3505. | ho2+mhp3j=oh+mhp3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3506. | ho2+mhp2j=oh+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3507. | ho2+mhpmj=oh+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3508. | ch3o2+mhp7j=ch3o+mhp7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3509. | ch3o2+mhp6j=ch3o+mhp6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3510. | ch3o2+mhp5j=ch3o+mhp5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3511. | ch3o2+mhp4j=ch3o+mhp4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3512. | ch3o2+mhp3j=ch3o+mhp3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3513. | ch3o2+mhp2j=ch3o+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3514. | ch3o2+mhpmj=ch3o+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3515. | mhp7ooh6j+o2=mhp7ooh6oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3516. | mhp7ooh5j+o2=mhp7ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3517. | mhp7ooh4j+o2=mhp7ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3518. | mhp7ooh3j+o2=mhp7ooh3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3519. | mhp6ooh7j+o2=mhp6ooh7oo | 1.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3520. | mhp6ooh5j+o2=mhp6ooh5oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3521. | mhp6ooh4j+o2=mhp6ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3522. | mhp6ooh3j+o2=mhp6ooh3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3523. | mhp6ooh2j+o2=mhp6ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 3524. | mhp5ooh7j+o2=mhp5ooh7oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3525. | mhp5ooh6j+o2=mhp5ooh6oo | 9.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3526. | mhp5ooh4j+o2=mhp5ooh4oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3527. | mhp5ooh3j+o2=mhp5ooh3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3528. | mhp5ooh2j+o2=mhp5ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 3529. | mhp4ooh7j+o2=mhp4ooh7oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3530. | mhp4ooh6j+o2=mhp4ooh6oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3531. | mhp4ooh5j+o2=mhp4ooh5oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3532. | mhp4ooh3j+o2=mhp4ooh3oo | 3.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3533. | mhp4ooh2j+o2=mhp4ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 3534. | mhp3ooh7j+o2=mhp3ooh7oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3535. | mhp3ooh6j+o2=mhp3ooh6oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3536. | mhp3ooh5j+o2=mhp3ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3537. | mhp3ooh4j+o2=mhp3ooh4oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3538. | mhp3ooh2j+o2=mhp3ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 3539. | mhp2ooh6j+o2=mhp2ooh6oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3540. | mhp2ooh5j+o2=mhp2ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3541. | mhp2ooh4j+o2=mhp2ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3542. | mhp2ooh3j+o2=mhp2ooh3oo | 1.00E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 3543. | mhp2oohmj+o2=mhp2oohmoo | 3.50E+11 | 0.0 | -1700.0 |
| 3544. | mhpmooh2j+o2=mhpmooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 3545. | mhp6d+ho2=mhp7ooh6j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3546. | mhp6d+ho2=mhp6ooh7j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3547. | mhp5d+ho2=mhp6ooh5j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3548. | mhp5d+ho2=mhp5ooh6j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3549. | mhp4d+ho2=mhp5ooh4j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3550. | mhp4d+ho2=mhp4ooh5j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3551. | mhp3d+ho2=mhp4ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3552. | mhp3d+ho2=mhp3ooh4j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 3553. | mhp2d+ho2=mhp3ooh2j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3554. | mhp2d+ho2=mhp2ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 3555. | mhp7ooh5j=>mhx5d+ch2o+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 3556. | mhp7ooh4j=>mpe4d+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3557. | mhp7ooh3j=>mb3d+c3h6ooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3558. | mhp6ooh4j=mpe4d+ch3hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3559. | mhp6ooh3j=mb3d+c3h6ooh2-1 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3560. | mhp6ooh2j=>mp2d+c2h4+oh+ch3hco | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3561. | mhp5ooh7j=>c2h4+mpe5*o+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3562. | mhp5ooh3j=>mb3d+c2h5hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3563. | mhp5ooh2j=>mp2d+c4h8+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3564. | mhp4ooh7j=>mpe4d+c2h4+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3565. | mhp4ooh6j=>mb4*o+c3h6+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3566. | mhp4ooh2j=>mp2d+nc3h7hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3567. | mhp3ooh7j=>mp3*o+oh+c2h4+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3568. | mhp3ooh6j=mb3ooh4j+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3569. | mhp3ooh5j=>mp3*o+c4h8+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3570. | mhp2ooh6j=mb2ooh4j+c3h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3571. | mhp2ooh5j=>mp2d+c4h8+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3572. | mhp2ooh4j=>me2*o+c5h10+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 3573. | mhp7ooh5j=>mhpcy7o5+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3574. | mhp7ooh4j=>mhpcy7o4+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3575. | mhp7ooh3j=>mhpcy7o3+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 3576. | mhp6ooh4j=>mhpcy6o4+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3577. | mhp6ooh3j=>mhpcy6o3+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3578. | mhp6ooh2j=>mhpcy6o2+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 3579. | mhp5ooh7j=>mhpcy7o5+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3580. | mhp5ooh3j=>mhpcy5o3+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3581. | mhp5ooh2j=>mhpcy5o2+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3582. | mhp4ooh7j=>mhpcy7o4+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3583. | mhp4ooh6j=>mhpcy6o4+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3584. | mhp4ooh2j=>mhpcy4o2+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3585. | mhp3ooh7j=>mhpcy7o3+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 3586. | mhp3ooh6j=>mhpcy6o3+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3587. | mhp3ooh5j=>mhpcy5o3+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3588. | mhp2ooh6j=>mhpcy6o2+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 3589. | mhp2ooh5j=>mhpcy5o2+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3590. | mhp2ooh4j=>mhpcy4o2+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 3591. | mhp2oohmj=>mhpcy2om+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3592. | mhpmooh2j=>mhpcy2om+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 3593. | mhp7oo=mhp7ooh6j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3594. | mhp7oo=mhp7ooh5j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3595. | mhp7oo=mhp7ooh4j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 3596. | mhp7oo=mhp7ooh3j | 1.72E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 3597. | mhp6oo=mhp6ooh7j | 4.95E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 3598. | mhp6oo=mhp6ooh5j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3599. | mhp6oo=mhp6ooh4j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3600. | mhp6oo=mhp6ooh3j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 3601. | mhp6oo=mhp6ooh2j | 1.70E+07 | 1.0 | 16000.0 |
| 3602. | mhp5oo=mhp5ooh7j | 8.55E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 3603. | mhp5oo=mhp5ooh6j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3604. | mhp5oo=mhp5ooh4j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3605. | mhp5oo=mhp5ooh3j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3606. | mhp5oo=mhp5ooh2j | 1.00E+08 | 1.0 | 17000.0 |
| 3607. | mhp4oo=mhp4ooh7j | 1.50E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3608. | mhp4oo=mhp4ooh6j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3609. | mhp4oo=mhp4ooh5j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3610. | mhp4oo=mhp4ooh3j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3611. | mhp4oo=mhp4ooh2j | 5.70E+08 | 1.0 | 18000.0 |
| 3612. | mhp3oo=mhp3ooh7j | 2.50E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 3613. | mhp3oo=mhp3ooh6j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 3614. | mhp3oo=mhp3ooh5j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3615. | mhp3oo=mhp3ooh4j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3616. | mhp3oo=mhp3ooh2j | 3.30E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 3617. | mhp2oo=mhp2ooh6j | 1.72E+07 | 1.0 | 21000.0 |
| 3618. | mhp2oo=mhp2ooh5j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 3619. | mhp2oo=mhp2ooh4j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3620. | mhp2oo=mhp2ooh3j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3621. | mhp2oo=mhp2oohmj | 1.50E+08 | 1.0 | 28500.0 |
| 3622. | mhpmoo=mhpmooh2j | 1.00E+08 | 1.0 | 21700.0 |
| 3623. | mhp7oo+mhp7oo=>mhp7o+mhp7o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3624. | mhp7oo+mhp6oo=>mhp7o+mhp6o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3625. | mhp7oo+mhp5oo=>mhp7o+mhp5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3626. | mhp7oo+mhp4oo=>mhp7o+mhp4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3627. | mhp7oo+mhp3oo=>mhp7o+mhp3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3628. | mhp7oo+mhp2oo=>mhp7o+mhp2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3629. | mhp7oo+mhpmoo=>mhp7o+mhpmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3630. | mhp6oo+mhp6oo=>mhp6o+mhp6o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3631. | mhp6oo+mhp5oo=>mhp6o+mhp5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3632. | mhp6oo+mhp4oo=>mhp6o+mhp4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3633. | mhp6oo+mhp3oo=>mhp6o+mhp3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3634. | mhp6oo+mhp2oo=>mhp6o+mhp2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3635. | mhp6oo+mhpmoo=>mhp6o+mhpmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3636. | mhp5oo+mhp5oo=>mhp5o+mhp5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3637. | mhp5oo+mhp4oo=>mhp5o+mhp4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3638. | mhp5oo+mhp3oo=>mhp5o+mhp3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3639. | mhp5oo+mhp2oo=>mhp5o+mhp2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3640. | mhp5oo+mhpmoo=>mhp5o+mhpmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3641. | mhp4oo+mhp4oo=>mhp4o+mhp4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3642. | mhp4oo+mhp3oo=>mhp4o+mhp3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3643. | mhp4oo+mhp2oo=>mhp4o+mhp2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3644. | mhp4oo+mhpmoo=>mhp4o+mhpmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3645. | mhp3oo+mhp3oo=>mhp3o+mhp3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3646. | mhp3oo+mhp2oo=>mhp3o+mhp2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3647. | mhp3oo+mhpmoo=>mhp3o+mhpmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3648. | mhp2oo+mhp2oo=>mhp2o+mhp2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3649. | mhp2oo+mhpmoo=>mhp2o+mhpmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3650. | mhpmoo+mhpmoo=>mhpmo+mhpmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3651. | mhp7oo+ch3o2=>mhp7o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3652. | mhp6oo+ch3o2=>mhp6o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3653. | mhp5oo+ch3o2=>mhp5o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3654. | mhp4oo+ch3o2=>mhp4o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3655. | mhp3oo+ch3o2=>mhp3o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3656. | mhp2oo+ch3o2=>mhp2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3657. | mhpmoo+ch3o2=>mhpmo+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3658. | mhp7oo+ho2=mhp7ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3659. | mhp6oo+ho2=mhp6ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3660. | mhp5oo+ho2=mhp5ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3661. | mhp4oo+ho2=mhp4ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3662. | mhp3oo+ho2=mhp3ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3663. | mhp2oo+ho2=mhp2ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3664. | mhpmoo+ho2=mhpmooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3665. | mhp7oo+h2o2=mhp7ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 3666. | mhp6oo+h2o2=mhp6ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 3667. | mhp5oo+h2o2=mhp5ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 3668. | mhp4oo+h2o2=mhp4ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 3669. | mhp3oo+h2o2=mhp3ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 3670. | mhp2oo+h2o2=mhp2ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 3671. | mhpmoo+h2o2=mhpmooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 3672. | mhp7oo+mhp7j=mhp7o+mhp7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3673. | mhp7oo+mhp6j=mhp7o+mhp6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3674. | mhp7oo+mhp5j=mhp7o+mhp5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3675. | mhp7oo+mhp4j=mhp7o+mhp4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3676. | mhp7oo+mhp3j=mhp7o+mhp3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3677. | mhp7oo+mhp2j=mhp7o+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3678. | mhp7oo+mhpmj=mhp7o+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3679. | mhp6oo+mhp6j=mhp6o+mhp6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3680. | mhp6oo+mhp5j=mhp6o+mhp5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3681. | mhp6oo+mhp4j=mhp6o+mhp4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3682. | mhp6oo+mhp3j=mhp6o+mhp3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3683. | mhp6oo+mhp2j=mhp6o+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3684. | mhp6oo+mhpmj=mhp6o+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3685. | mhp5oo+mhp5j=mhp5o+mhp5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3686. | mhp5oo+mhp4j=mhp5o+mhp4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3687. | mhp5oo+mhp3j=mhp5o+mhp3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3688. | mhp5oo+mhp2j=mhp5o+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3689. | mhp5oo+mhpmj=mhp5o+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3690. | mhp4oo+mhp4j=mhp4o+mhp4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3691. | mhp4oo+mhp3j=mhp4o+mhp3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3692. | mhp4oo+mhp2j=mhp4o+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3693. | mhp4oo+mhpmj=mhp4o+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3694. | mhp3oo+mhp3j=mhp3o+mhp3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3695. | mhp3oo+mhp2j=mhp3o+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3696. | mhp3oo+mhpmj=mhp3o+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3697. | mhp2oo+mhp2j=mhp2o+mhp2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3698. | mhp2oo+mhpmj=mhp2o+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3699. | mhpmoo+mhpmj=mhpmo+mhpmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3700. | mhp7oo+ch3=mhp7o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3701. | mhp6oo+ch3=mhp6o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3702. | mhp5oo+ch3=mhp5o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3703. | mhp4oo+ch3=mhp4o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3704. | mhp3oo+ch3=mhp3o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3705. | mhp2oo+ch3=mhp2o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3706. | mhpmoo+ch3=mhpmo+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3707. | mhp7ooh6oo=mhp6ooh7oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 3708. | mhp6ooh5oo=mhp5ooh6oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 3709. | mhp5ooh4oo=mhp4ooh5oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 3710. | mhp4ooh3oo=mhp3ooh4oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 3711. | mhp3ooh2oo=mhp2ooh3oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 3712. | mhp7ooh6oo=>mhp6ooh7*o+oh | 3.30E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 3713. | mhp7ooh5oo=>mhp5ooh7*o+oh | 5.70E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 3714. | mhp7ooh4oo=>mhp4ooh7*o+oh | 1.00E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3715. | mhp7ooh3oo=>mhp3ooh7*o+oh | 1.70E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 3716. | mhp6ooh7oo=>mhp7ooh6*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3717. | mhp6ooh5oo=>mhp5ooh6*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3718. | mhp6ooh4oo=>mhp4ooh6*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3719. | mhp6ooh3oo=>mhp3ooh6*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 3720. | mhp6ooh2oo=>mhp2ooh6*o+oh | 8.60E+06 | 1.0 | 21000.0 |
| 3721. | mhp5ooh7oo=>mhp7ooh5*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3722. | mhp5ooh6oo=>mhp5ooh6*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3723. | mhp5ooh4oo=>mhp4ooh5*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3724. | mhp5ooh3oo=>mhp3ooh5*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3725. | mhp5ooh2oo=>mhp2ooh5*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 3726. | mhp4ooh7oo=>mhp7ooh4*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 3727. | mhp4ooh6oo=>mhp6ooh4*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3728. | mhp4ooh5oo=>mhp5ooh4*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3729. | mhp4ooh3oo=>mhp3ooh4*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3730. | mhp4ooh2oo=>mhp2ooh4*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3731. | mhp3ooh7oo=>mhp7ooh3*o+oh | 8.60E+06 | 1.0 | 21000.0 |
| 3732. | mhp3ooh6oo=>mhp6ooh3*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 3733. | mhp3ooh5oo=>mhp5ooh3*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 3734. | mhp3ooh4oo=>mhp4ooh3*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3735. | mhp3ooh2oo=>mhp2ooh3*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 3736. | mhp2ooh6oo=>mhp6ooh2*o+oh | 8.50E+06 | 1.0 | 16000.0 |
| 3737. | mhp2ooh5oo=>mhp5ooh2*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 17000.0 |
| 3738. | mhp2ooh4oo=>mhp4ooh2*o+oh | 2.85E+07 | 1.0 | 20000.0 |
| 3739. | mhp2ooh3oo=>mhp3ooh2*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 3740. | mhp2oohmoo=>mhpmooh2*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 21700.0 |
| 3741. | mhpmooh2oo=>mhp2oohm*o+oh | 1.00E+08 | 1.0 | 28500.0 |
| 3742. | mhp7ooh=mhp7o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 3743. | mhp6ooh=mhp6o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 3744. | mhp5ooh=mhp5o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 3745. | mhp4ooh=mhp4o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 3746. | mhp3ooh=mhp3o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 3747. | mhp2ooh=mhp2o+oh | 5.95E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| 3748. | mhpmooh=mhpmo+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 3749. | ch2o+mhx6j=mhp7o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3750. | ch3hco+mpe5j=mhp6o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3751. | ch3+mhx6*o=mhp6o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3752. | c2h5hco+mb4j=mhp5o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3753. | c2h5+mpe5*o=mhp5o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3754. | nc3h7hco+mp3j=mhp4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3755. | nc3h7+mb4*o=mhp4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3756. | nc4h9hco+me2j=mhp3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3757. | pc4h9+mp3*o=mhp3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3758. | c5h11hco+ch3oco=mhp2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3759. | Ac5h11+me2*o=mhp2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3760. | ch2o+hpaoj=mhpmo | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 3761. | mhp7*o+h=mhp7o | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 3762. | mhpm*o+h=mhpmo | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 3763. | mhpcy7o5+h=>mpe5j*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3764. | mhpcy7o5+h=>mhx5d+hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 3765. | mhpcy7o4+h=>mpe5j4*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3766. | mhpcy7o4+h=>mpe4d+ch2hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 3767. | mhpcy7o3+h=>mpe5j3*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3768. | mhpcy7o3+h=>mb3d+ch2ch2hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 3769. | mhpcy6o4+h=>mb4j*o+c3h6+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3770. | mhpcy6o4+h=>mpe4d+ch3co+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3771. | mhpcy6o3+h=>mb4j3*o+c3h6+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3772. | mhpcy6o3+h=>mb3d+ch2coch3+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3773. | mhpcy6o2+h=>mp2d+ch3coc2h4p+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3774. | mhpcy5o3+h=>mp3j*o+c4h8+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3775. | mhpcy5o3+h=>mb3d+c2h5co+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3776. | mhpcy5o2+h=>mp2d+c2h5coch2+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3777. | mhpcy4o2+h=>mp2d+nc3h7co+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 3778. | mhpcy2om+h=>c6h12co+ocho+h2 | 1.92E+09 | 1.5 | 2785.0 |
| 3779. | mhpcy7o5+oh=>mpe5j*o+c2h4+h2o | 1.20E+08 | 2.0 | -1192.0 |
| 3780. | mhpcy7o5+oh=>mhx5d+hco+h2o | 2.40E+08 | 2.0 | -1192.0 |
| 3781. | mhpcy7o4+oh=>mpe5j4*o+c2h4+h2o | 1.20E+08 | 2.0 | -1192.0 |
| 3782. | mhpcy7o4+oh=>mpe4d+ch2hco+h2o | 2.40E+08 | 2.0 | -1192.0 |
| 3783. | mhpcy7o3+oh=>mpe5j3*o+c2h4+h2o | 1.20E+08 | 2.0 | -1192.0 |
| 3784. | mhpcy7o3+oh=>mb3d+ch2ch2hco+h2o | 2.40E+08 | 2.0 | -1192.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 3785. | mhpcy6o4+oh=>mb4j*o+c3h6+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3786. | mhpcy6o4+oh=>mpe4d+ch3co+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3787. | mhpcy6o3+oh=>mb4j3*o+c3h6+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3788. | mhpcy6o3+oh=>mb3d+ch2coch3+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3789. | mhpcy6o2+oh=>mp2d+ch3coc2h4p+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3790. | mhpcy5o3+oh=>mp3j*o+c4h8+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3791. | mhpcy5o3+oh=>mb3d+c2h5co+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3792. | mhpcy5o2+oh=>mp2d+c2h5coch2+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3793. | mhpcy4o2+oh=>mp2d+nc3h7co+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 3794. | mhpcy2om+oh=>c6h12co+ocho+h2o | 1.76E+07 | 2.0 | -1192.0 |
| 3795. | mhpcy7o5+ho2=>mpe5j*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3796. | mhpcy7o5+ho2=>mhx5d+hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 3797. | mhpcy7o4+ho2=>mpe5j4*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3798. | mhpcy7o4+ho2=>mpe4d+ch2hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 3799. | mhpcy7o3+ho2=>mpe5j3*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3800. | mhpcy7o3+ho2=>mb3d+ch2ch2hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 3801. | mhpcy6o4+ho2=>mb4j*o+c3h6+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3802. | mhpcy6o4+ho2=>mpe4d+ch3co+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3803. | mhpcy6o3+ho2=>mb4j3*o+c3h6+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3804. | mhpcy6o3+ho2=>mb3d+ch2coch3+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3805. | mhpcy6o2+ho2=>mp2d+ch3coc2h4p+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3806. | mhpcy5o3+ho2=>mp3j*o+c4h8+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3807. | mhpcy5o3+ho2=>mb3d+c2h5co+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3808. | mhpcy5o2+ho2=>mp2d+c2h5coch2+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3809. | mhpcy4o2+ho2=>mp2d+nc3h7co+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 3810. | mhpcy2om+ho2=>c6h12co+ocho+h2o2 | 1.60E+13 | 0.0 | 14400.0 |
| 3811. | mhpcy7o5+ch3o=>mpe5j*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3812. | mhpcy7o5+ch3o=>mhx5d+hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3813. | mhpcy7o4+ch3o=>mpe5j4*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3814. | mhpcy7o4+ch3o=>mpe4d+ch2hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3815. | mhpcy7o3+ch3o=>mpe5j3*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3816. | mhpcy7o3+ch3o=>mb3d+ch2ch2hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3817. | mhpcy6o4+ch3o=>mb4j*o+c3h6+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3818. | mhpcy6o4+ch3o=>mpe4d+ch3co+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3819. | mhpcy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c3h6+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3820. | mhpcy6o3+ch3o=>mb3d+ch2coch3+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3821. | mhpcy6o2+ch3o=>mp2d+ch3coc2h4p+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3822. | mhpcy5o3+ch3o=>mp3j*o+c4h8+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3823. | mhpcy5o3+ch3o=>mb3d+c2h5co+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3824. | mhpcy5o2+ch3o=>mp2d+c2h5coch2+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3825. | mhpcy4o2+ch3o=>mp2d+nc3h7co+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3826. | mhpcy2om+ch3o=>c6h12co+ocho+ch3oh | 8.76E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 3827. | mhpcy7o5+ch3o2=>mpe5j*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3828. | mhpcy7o5+ch3o2=>mhx5d+hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3829. | mhpcy7o4+ch3o2=>mpe5j4*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3830. | mhpcy7o4+ch3o2=>mpe4d+ch2hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3831. | mhpcy7o3+ch3o2=>mpe5j3*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3832. | mhpcy7o3+ch3o2=>mb3d+ch2ch2hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3833. | mhpcy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c3h6+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3834. | mhpcy6o4+ch3o2=>mpe4d+ch3co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3835. | mhpcy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c3h6+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3836. | mhpcy6o3+ch3o2=>mb3d+ch2coch3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3837. | mhpcy6o2+ch3o2=>mp2d+ch3coc2h4p+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3838. | mhpcy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c4h8+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3839. | mhpcy5o3+ch3o2=>mb3d+c2h5co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3840. | mhpcy5o2+ch3o2=>mp2d+c2h5coch2+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3841. | mhpcy4o2+ch3o2=>mp2d+nc3h7co+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3842. | mhpcy2om+ch3o2=>c6h12co+ocho+ch3o2h | 1.60E+13 | 0.0 | 17700.0 |
| 3843. | mhp6ooh7*o=>mhx6*o+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3844. | mhp5ooh7*o=>mpe5*o+ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3845. | mhp5ooh7*o=>mb4j+hcoch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3846. | mhp4ooh7*o=>mb4*o+ch2ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3847. | mhp4ooh7*o=>mp3j+choc2h4cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3848. | mhp3ooh7*o=>mp3*o+c3h6hco-1+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3849. | mhp3ooh7*o=>me2j+choc3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3850. | mhp7ooh6*o=>mhx6j*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3851. | mhp5ooh6*o=>mpe5*o+ch3co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3852. | mhp4ooh6*o=>mb4*o+ch2coch3+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3853. | mhp4ooh6*o=>mp3j+c4ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3854. | mhp3ooh6*o=>mp3*o+ch3coc2h4p+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3855. | mhp3ooh6*o=>me2j+c5ald4oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3856. | mhp2ooh6*o=>ch3oco+c6ald5oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3857. | mhp7ooh5*o=>mhx6j5*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3858. | mhp4ooh5*o=>mb4*o+c2h5co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3859. | mhp3ooh5*o=>mp3*o+c2h5coch2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3860. | mhp3ooh5*o=>me2j+c5ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3861. | mhp2ooh5*o=>ch3oco+c6ald4oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3862. | mhp7ooh4*o=>mhx6j4*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3863. | mhp6ooh4*o=>mpe5j4*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3864. | mhp5ooh4*o=>mpe5*o4*o+c2h5+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3865. | mhp5ooh4*o=>mb4j*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3866. | mhp3ooh4*o=>mp3*o+nc3h7co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3867. | mhp2ooh4*o=>ch3oco+c6ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3868. | mhp7ooh3*o=>mhx6j3*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3869. | mhp6ooh3*o=>mpe5j3*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3870. | mhp5ooh3*o=>mb4j3*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3871. | mhp4ooh3*o=>mp3j*o+nc3h7hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3872. | mhp2ooh3*o=>ch3oco+c4h9cocho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3873. | mhp6ooh2*o=>mpe5j2*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3874. | mhp5ooh2*o=>mb4j2*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3875. | mhp4ooh2*o=>mp3j2*o+nc3h7hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3876. | mhp3ooh2*o=>me2j*o+nc4h9hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3877. | mhpmooh2*o=>hpaoj2*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3878. | mhp2oohm*o=>chooco+c5h11hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 3879. | mhp6d+o=mhp6d5j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3880. | mhp6d+o=mhp6d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3881. | mhp6d+h=mhp6d5j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3882. | mhp6d+h=mhp6d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3883. | mhp6d+oh=mhp6d5j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3884. | mhp6d+oh=mhp6d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3885. | mhp6d+ho2=mhp6d5j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3886. | mhp6d+ho2=mhp6d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3887. | mhp6d+ch3o=mhp6d5j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3888. | mhp6d+ch3o=mhp6d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3889. | mhp6d=me2j+Ec5h9-1 | 2.50E+16 | 0.0 | 68000.0 |
| 3890. | mhp6d=mp3j+Cc4h7-1 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 3891. | mhp6d=mb4j+ac3h5 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 3892. | c2h3+mpe5j=mhp6d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3893. | mhp6d+o2=mhp6d5j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3894. | mhp6d+o2=mhp6d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3895. | mhp6d+o=mhx6j+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3896. | mhp6d5j+h=mhp6d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3897. | mhp6d2j+h=mhp6d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3898. | mhp6d5j=mp3j+c4h6 | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3899. | mhp6d2j=mp2d+Cc4h7-1 | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3900. | c6h10co+ch3o=mhp6d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3901. | mhp5d+o=mhp6d5j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3902. | mhp5d+o=mhp5d4j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3903. | mhp5d+o=mhp5d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3904. | mhp5d+h=mhp6d5j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3905. | mhp5d+h=mhp5d4j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3906. | mhp5d+h=mhp5d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 3907. mhp5d+oh=mhp6d5j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3908. mhp5d+oh=mhp5d4j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3909. mhp5d+oh=mhp5d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3910. mhp5d+ho2=mhp6d5j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3911. mhp5d+ho2=mhp5d4j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3912. mhp5d+ho2=mhp5d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3913. mhp5d+ch3o=mhp6d5j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3914. mhp5d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3915. mhp5d+ch3o=mhp5d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3916. mhp5d+o2=mhp5d4j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3917. mhp5d+o2=mhp5d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3918. mhp5d+o=mpe5j+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3919. mhp5d4j+h=mhp5d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3920. mhp5d2j+h=mhp5d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3921. mhp5d4j=c5h8-13+me2j | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3922. mhp5d2j=Cc4h7-1+mp2d | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 3923. c6h10co+ch3o=mhp5d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3924. mhp4d+o=mhp5d4j+oh | 1.74E+11 | 0.7 | 5900.0 |
| 3925. mhp4d+o=mhp4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3926. mhp4d+o=mhp4d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3927. mhp4d+h=mhp5d4j+h2 | 1.74E+05 | 2.5 | 2510.0 |
| 3928. mhp4d+h=mhp4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3929. mhp4d+h=mhp4d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3930. mhp4d+oh=mhp5d4j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -2980.0 |
| 3931. mhp4d+oh=mhp4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3932. mhp4d+oh=mhp4d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3933. mhp4d+ho2=mhp5d4j+h2o2 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 |
| 3934. mhp4d+ho2=mhp4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3935. mhp4d+ho2=mhp4d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3936. mhp4d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh | 1.98E+12 | 0.0 | 4000.0 |
| 3937. mhp4d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3938. mhp4d+ch3o=mhp4d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3939. mhp4d+o2=mhp5d4j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3940. mhp4d+o2=mhp4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3941. mhp4d+o2=mhp4d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3942. mhp4d+o=mb4j+c2h5co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3943. mhp4d3j+h=mhp4d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3944. mhp4d3j=c6h10-13+ch3oco | 1.30E+13 | 0.0 | 33900.0 |
| 3945. mhp4d2j=mp2d+Cc4h7-1 | 1.30E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| 3946. c6h10co+ch3o=mhp4d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3947. mhp3d+o=mhp4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3948. mhp3d+o=mhp3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3949. mhp3d+h=mhp4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3950. mhp3d+h=mhp3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3951. mhp3d+oh=mhp4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3952. mhp3d+oh=mhp3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3953. mhp3d+ho2=mhp4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3954. mhp3d+ho2=mhp3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3955. mhp3d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3956. mhp3d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3957. mhp3d+o2=mhp4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3958. mhp3d+o2=mhp3d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 3959. mhp3d+o=mp3j+nc3h7co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3960. mhp3d2j+h=mhp3d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3961. mhp3d2j=mpe4d2d+c2h5 | 2.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| 3962. c6h10co+ch3o=mhp3d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 3963. mhp2d+o=mhp3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 3964. mhp2d+h=mhp3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 3965. mhp2d+oh=mhp3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3966. mhp2d+ho2=mhp3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3967. mhp2d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3968. mhp2d+o2=mhp3d2j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 3969. mhp2d+o=me2j+nc4h9co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3970. mhp6d+oh=mhp6oh7j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3971. mhp5d+oh=mhp5oh6j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3972. mhp4d+oh=mhp4oh5j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3973. mhp3d+oh=mhp3oh4j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3974. mhp2d+oh=mhp2oh3j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 3975. mhp6oh7j+o2=mhp6oh7oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3976. mhp5oh6j+o2=mhp5oh6oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3977. mhp4oh5j+o2=mhp4oh5oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3978. mhp3oh4j+o2=mhp3oh4oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3979. mhp2oh3j+o2=mhp2oh3oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 3980. mhp6oh7oo=>mhx6*o+oh+ch2o | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3981. mhp5oh6oo=>mpe5*o+oh+ch3hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3982. mhp4oh5oo=>mb4*o+oh+c2h5hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3983. mhp3oh4oo=>mp3*o+oh+nc3h7hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3984. mhp2oh3oo=>me2*o+oh+nc4h9hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 3985. hco+mhx6j=mhp7*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3986. mhp7*o+o2=mhp7j*o+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 3987. mhp7*o+h=mhp7j*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 3988. mhp7*o+oh=mhp7j*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 3989. mhp7*o+o=mhp7j*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 3990. mhp7*o+ho2=mhp7j*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 3991. mhp7j*o=mhx6j+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 3992. mhp7j6*o=>ch2co+mpe5j | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 3993. c2h4+mpe5j*o=mhp7j5*o | 2.11E+11 | 0.0 | 7350.0 |
| 3994. hco+mhx6j5*o=mhp7*o5*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3995. mhp6d4d+oh=h2o+nc4h5+mp2d | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3996. mhp6d4d+h=h2+nc4h5+mp2d | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3997. mhp7*o5*o+h=mhp7j*o5*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 3998. mhp7*o5*o+oh=mhp7j*o5*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 3999. mhp7*o5*o+o=mhp7j*o5*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 4000. mhp7*o5*o+ho2=mhp7j*o5*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 4001. mhp7*o5*o+ch3=mhp7j*o5*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 4002. mhp7*o5*o+ch3o=mhp7j*o5*o+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 4003. mhp7*o5*o+ch3o2=mhp7j*o5*o+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 4004. mhp7j*o5*o=co+mhx6j5*o | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 4005. mhx=mhx6j+h | 7.90E+15 | 0.0 | 97970.0 |
| 4006. mhx=mhx5j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 4007. mhx=mhx4j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 4008. mhx=mhx3j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 4009. mhx2j+h=mhx | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 4010. mhx=mhxmj+h | 7.90E+15 | 0.0 | 93970.0 |
| 4011. mhx=mpe5j+ch3 | 5.00E+16 | 0.0 | 84660.0 |
| 4012. mhx=mb4j+c2h5 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 4013. mhx=mp3j+nc3h7 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 4014. mhx=me2j+pc4h9 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 4015. mhx=ch3oco+Ac5h11 | 1.13E+16 | 0.0 | 77700.0 |
| 4016. c5h11co+ch3o=mhx | 1.50E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4017. mhx=hxaoj+ch3 | 3.16E+16 | 0.0 | 83070.0 |
| 4018. mhx+o2=mhx6j+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 4019. mhx+o2=mhx5j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 4020. mhx+o2=mhx4j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 4021. mhx+o2=mhx3j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 4022. mhx+o2=mhx2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4023. mhx+o2=mhxmj+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 44910.0 |
| 4024. mhx+h=mhx6j+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| 4025. mhx+h=mhx5j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 4026. mhx+h=mhx4j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 4027. mhx+h=mhx3j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 4028. mhx+h=mhx2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4029. | mhx+h=mhxmj+h2 | 1.44E+13 | 0.0 | 6095.0 |
| 4030. | mhx+o=mhx6j+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 4031. | mhx+o=mhx5j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 4032. | mhx+o=mhx4j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 4033. | mhx+o=mhx3j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 4034. | mhx+o=mhx2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4035. | mhx+o=mhxmj+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 4036. | mhx+oh=mhx6j+h2o | 5.25E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| 4037. | mhx+oh=mhx5j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 4038. | mhx+oh=mhx4j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 4039. | mhx+oh=mhx3j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 4040. | mhx+oh=mhx2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4041. | mhx+oh=mhxmj+h2o | 7.10E+06 | 1.8 | -596.0 |
| 4042. | mhx+ho2=mhx6j+h2o2 | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4043. | mhx+ho2=mhx5j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4044. | mhx+ho2=mhx4j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4045. | mhx+ho2=mhx3j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4046. | mhx+ho2=mhx2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4047. | mhx+ho2=mhxmj+h2o2 | 9.64E+10 | 0.0 | 12580.0 |
| 4048. | mhx+hco=mhx6j+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 4049. | mhx+hco=mhx5j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 4050. | mhx+hco=mhx4j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 4051. | mhx+hco=mhx3j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 4052. | mhx+hco=mhx2j+ch2o | 1.14E+09 | 1.3 | 15500.0 |
| 4053. | mhx+hco=mhxmj+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 4054. | mhx+ch3=mhx6j+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 4055. | mhx+ch3=mhx5j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 4056. | mhx+ch3=mhx4j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 4057. | mhx+ch3=mhx3j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 4058. | mhx+ch3=mhx2j+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4059. | mhx+ch3=mhxmj+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 4060. | mhx+ch3o=mhx6j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4061. | mhx+ch3o=mhx5j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4062. | mhx+ch3o=mhx4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4063. | mhx+ch3o=mhx3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4064. | mhx+ch3o=mhx2j+ch3oh | 1.78E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4065. | mhx+ch3o=mhxmj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4066. | mhx+ch2oh=mhx6j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4067. | mhx+ch2oh=mhx5j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4068. | mhx+ch2oh=mhx4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4069. | mhx+ch2oh=mhx3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4070. | mhx+ch2oh=mhx2j+ch3oh | 3.60E+01 | 3.0 | 10000.0 |
| 4071. | mhx+ch2oh=mhxmj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4072. | mhx+ch3o2=mhx6j+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4073. | mhx+ch3o2=mhx5j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4074. | mhx+ch3o2=mhx4j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4075. | mhx+ch3o2=mhx3j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4076. | mhx+ch3o2=mhx2j+ch3o2h | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4077. | mhx+ch3o2=mhxmj+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4078. | mhx+c2h3=mhx6j+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 4079. | mhx+c2h3=mhx5j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 4080. | mhx+c2h3=mhx4j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 4081. | mhx+c2h3=mhx3j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 4082. | mhx+c2h3=mhx2j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| 4083. | mhx+c2h3=mhxmj+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 4084. | mhx+c2h5=mhx6j+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 4085. | mhx+c2h5=mhx5j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 4086. | mhx+c2h5=mhx4j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 4087. | mhx+c2h5=mhx3j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 4088. | mhx+c2h5=mhx2j+c2h6 | 2.20E+00 | 3.5 | 4140.0 |
| 4089. | mhx+c2h5=mhxmj+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 4090. | mhx+ac3h5=mhx6j+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4091. | mhx+ac3h5=mhx5j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4092. | mhx+ac3h5=mhx4j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4093. | mhx+ac3h5=mhx3j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4094. | mhx+ac3h5=mhx2j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 17170.0 |
| 4095. | mhx+ac3h5=mhxmj+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4096. | mhx+mhx2j=mhx6j+mhx | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4097. | mhx+mhx2j=mhx5j+mhx | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4098. | mhx+mhx2j=mhx4j+mhx | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4099. | mhx+mhx2j=mhx3j+mhx | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4100. | mhx+mhx2j=mhxmj+mhx | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4101. | mhx+mhx6oo=mhx6j+mhx6ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4102. | mhx+mhx6oo=mhx5j+mhx6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4103. | mhx+mhx6oo=mhx4j+mhx6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4104. | mhx+mhx6oo=mhx3j+mhx6ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4105. | mhx+mhx6oo=mhx2j+mhx6ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 4106. | mhx+mhx6oo=mhxmj+mhx6ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4107. | mhx+mhx5oo=mhx6j+mhx5ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4108. | mhx+mhx5oo=mhx5j+mhx5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4109. | mhx+mhx5oo=mhx4j+mhx5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4110. | mhx+mhx5oo=mhx3j+mhx5ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4111. | mhx+mhx5oo=mhx2j+mhx5ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 4112. | mhx+mhx5oo=mhxmj+mhx5ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4113. | mhx+mhx4oo=mhx6j+mhx4ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4114. | mhx+mhx4oo=mhx5j+mhx4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4115. | mhx+mhx4oo=mhx4j+mhx4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4116. | mhx+mhx4oo=mhx3j+mhx4ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4117. | mhx+mhx4oo=mhx2j+mhx4ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 4118. | mhx+mhx4oo=mhxmj+mhx4ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4119. | mhx+mhx3oo=mhx6j+mhx3ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4120. | mhx+mhx3oo=mhx5j+mhx3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4121. | mhx+mhx3oo=mhx4j+mhx3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4122. | mhx+mhx3oo=mhx3j+mhx3ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4123. | mhx+mhx3oo=mhx2j+mhx3ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 4124. | mhx+mhx3oo=mhxmj+mhx3ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4125. | mhx+mhx2oo=mhx6j+mhx2ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4126. | mhx+mhx2oo=mhx5j+mhx2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4127. | mhx+mhx2oo=mhx4j+mhx2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4128. | mhx+mhx2oo=mhx3j+mhx2ooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4129. | mhx+mhx2oo=mhx2j+mhx2ooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 4130. | mhx+mhx2oo=mhxmj+mhx2ooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4131. | mhx+mhxmoo=mhx6j+mhxmooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4132. | mhx+mhxmoo=mhx5j+mhxmooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4133. | mhx+mhxmoo=mhx4j+mhxmooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4134. | mhx+mhxmoo=mhx3j+mhxmooh | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4135. | mhx+mhxmoo=mhx2j+mhxmooh | 1.00E+12 | 0.0 | 14550.0 |
| 4136. | mhx+mhxmoo=mhxmj+mhxmooh | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4137. | mhx6j+o2=mhx6oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4138. | mhx5j+o2=mhx5oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4139. | mhx4j+o2=mhx4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4140. | mhx3j+o2=mhx3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4141. | mhx2j+o2=mhx2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 4142. | mhxmj+o2=mhxmoo | 3.50E+11 | 0.0 | -1700.0 |
| 4143. | mhx6j=mhx3j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 4144. | mhx3j=mhxmj | 2.50E+07 | 1.0 | 14500.0 |
| 4145. | mhx2j=mhx6j | 2.50E+07 | 1.0 | 14500.0 |
| 4146. | mhx2j=mhx5j | 9.90E+07 | 1.0 | 17300.0 |
| 4147. | mhx2j=mhxmj | 1.50E+08 | 1.0 | 22800.0 |
| 4148. | mhxmj=mhx4j | 2.90E+06 | 1.0 | 17400.0 |
| 4149. | mhx6j=c2h4+mb4j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4150. | mhx5j=c3h6+mp3j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4151. | mhx4j=c4h8+me2j | 2.00E+13 | 0.0 | 24700.0 |
| 4152. | mhx4j=ch3+mpe4d | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 4153. | mhx3j=c5h10+ch3oco | 2.00E+13 | 0.0 | 30500.0 |
| 4154. | mhx3j=c2h5+mb3d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4155. | mhx2j=nc3h7+mp2d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4156. | c5h10co+ch3o=mhx2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4157. | mhxmj=ch2o+c5h11co | 1.64E+22 | -2.3 | 31950.0 |
| 4158. | co2+Ac5h11=hxaoj | 1.00E+11 | 0.0 | 39360.0 |
| 4159. | mhx6j=h+mhx5d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4160. | mhx5j=h+mhx5d | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| 4161. | mhx5j=h+mhx4d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4162. | mhx4j=h+mhx4d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4163. | mhx4j=h+mhx3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4164. | mhx3j=h+mhx3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4165. | mhx3j=h+mhx2d | 3.20E+13 | 0.0 | 34800.0 |
| 4166. | mhx2j=h+mhx2d | 3.00E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| 4167. | mhx6j+o2=mhx5d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4168. | mhx5j+o2=mhx5d+ho2 | 8.07E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4169. | mhx5j+o2=mhx4d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4170. | mhx4j+o2=mhx4d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4171. | mhx4j+o2=mhx3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4172. | mhx3j+o2=mhx3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4173. | mhx3j+o2=mhx2d+ho2 | 2.60E+11 | 0.0 | 2500.0 |
| 4174. | mhx2j+o2=mhx2d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 |
| 4175. | ho2+mhx6j=oh+mhx6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4176. | ho2+mhx5j=oh+mhx5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4177. | ho2+mhx4j=oh+mhx4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4178. | ho2+mhx3j=oh+mhx3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4179. | ho2+mhx2j=oh+mhx2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4180. | ho2+mhxmj=oh+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4181. | ch3o2+mhx6j=ch3o+mhx6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4182. | ch3o2+mhx5j=ch3o+mhx5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4183. | ch3o2+mhx4j=ch3o+mhx4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4184. | ch3o2+mhx3j=ch3o+mhx3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4185. | ch3o2+mhx2j=ch3o+mhx2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4186. | ch3o2+mhxmj=ch3o+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4187. | mhx6ooh5j+o2=mhx6ooh5oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4188. | mhx6ooh4j+o2=mhx6ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4189. | mhx6ooh3j+o2=mhx6ooh3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4190. | mhx6ooh2j+o2=mhx6ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 4191. | mhx5ooh6j+o2=mhx5ooh6oo | 1.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4192. | mhx5ooh4j+o2=mhx5ooh4oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4193. | mhx5ooh3j+o2=mhx5ooh3oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4194. | mhx5ooh2j+o2=mhx5ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 4195. | mhx4ooh6j+o2=mhx4ooh6oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4196. | mhx4ooh5j+o2=mhx4ooh5oo | 9.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4197. | mhx4ooh3j+o2=mhx4ooh3oo | 3.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4198. | mhx4ooh2j+o2=mhx4ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 4199. | mhx3ooh6j+o2=mhx3ooh6oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4200. | mhx3ooh5j+o2=mhx3ooh5oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4201. | mhx3ooh4j+o2=mhx3ooh4oo | 1.05E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4202. | mhx3ooh2j+o2=mhx3ooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 4203. | mhx2ooh6j+o2=mhx2ooh6oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4204. | mhx2ooh5j+o2=mhx2ooh5oo | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4205. | mhx2ooh4j+o2=mhx2ooh4oo | 1.80E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4206. | mhx2ooh3j+o2=mhx2ooh3oo | 1.00E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 4207. | mhx2oohmj+o2=mhx2oohmoo | 3.50E+11 | 0.0 | -1700.0 |
| 4208. | mhxmooh2j+o2=mhxmooh2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 4209. | mhx5d+ho2=mhx6ooh5j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4210. | mhx5d+ho2=mhx5ooh6j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4211. | mhx4d+ho2=mhx5ooh4j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4212. | mhx4d+ho2=mhx4ooh5j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4213. | mhx3d+ho2=mhx4ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4214. | mhx3d+ho2=mhx3ooh4j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4215. | mhx2d+ho2=mhx3ooh2j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4216. | mhx2d+ho2=mhx2ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4217. | mhx6ooh4j=>mpe4d+ch2o+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 |
| 4218. | mhx6ooh3j=>mb3d+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4219. | mhx6ooh2j=>mp2d+c3h6ooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4220. | mhx5ooh3j=>mb3d+ch3hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4221. | mhx5ooh2j=>mp2d+c3h6+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4222. | mhx4ooh6j=>mb4*o+c2h4+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4223. | mhx4ooh2j=>mp2d+c2h5hco+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4224. | mhx3ooh6j=>mb3d+c2h4+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4225. | mhx3ooh5j=>mp3*o+c3h6+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4226. | mhx2ooh6j=>mb2ooh4j+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4227. | mhx2ooh5j=>mp2d+c3h6+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4228. | mhx2ooh4j=>me2*o+c4h8+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4229. | mhx6ooh4j=>mhxcy6o4+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 4230. | mhx6ooh3j=>mhxcy6o3+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4231. | mhx6ooh2j=>mhxcy6o2+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 4232. | mhx5ooh3j=>mhxcy5o3+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 4233. | mhx5ooh2j=>mhxcy5o2+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4234. | mhx4ooh6j=>mhxcy6o4+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 4235. | mhx4ooh2j=>mhxcy4o2+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 4236. | mhx3ooh6j=>mhxcy6o3+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4237. | mhx3ooh5j=>mhxcy5o3+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 4238. | mhx2ooh6j=>mhxcy6o2+oh | 1.70E+08 | 0.0 | 1950.0 |
| 4239. | mhx2ooh5j=>mhxcy5o2+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4240. | mhx2ooh4j=>mhxcy4o2+oh | 9.10E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 4241. | mhx2oohmj=>mhxcy2om+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4242. | mhxmooh2j=>mhxcy2om+oh | 3.60E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4243. | mhx6oo=mhx6ooh5j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4244. | mhx6oo=mhx6ooh4j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4245. | mhx6oo=mhx6ooh3j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 4246. | mhx6oo=mhx6ooh2j | 1.70E+07 | 1.0 | 16000.0 |
| 4247. | mhx5oo=mhx5ooh6j | 4.95E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 4248. | mhx5oo=mhx5ooh4j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4249. | mhx5oo=mhx5ooh3j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4250. | mhx5oo=mhx5ooh2j | 1.00E+08 | 1.0 | 17000.0 |
| 4251. | mhx4oo=mhx4ooh6j | 8.55E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 4252. | mhx4oo=mhx4ooh5j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4253. | mhx4oo=mhx4ooh3j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4254. | mhx4oo=mhx4ooh2j | 5.70E+08 | 1.0 | 18000.0 |
| 4255. | mhx3oo=mhx3ooh6j | 1.50E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4256. | mhx3oo=mhx3ooh5j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4257. | mhx3oo=mhx3ooh4j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4258. | mhx3oo=mhx3ooh2j | 3.30E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 4259. | mhx2oo=mhx2ooh6j | 2.50E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 4260. | mhx2oo=mhx2ooh5j | 1.00E+08 | 1.0 | 22000.0 |
| 4261. | mhx2oo=mhx2ooh4j | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4262. | mhx2oo=mhx2ooh3j | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4263. | mhx2oo=mhx2oohmj | 1.50E+08 | 1.0 | 28500.0 |
| 4264. | mhxmoo=mhxmooh2j | 1.00E+08 | 1.0 | 21700.0 |
| 4265. | mhx6oo+mhx6oo=>mhx6o+mhx6o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4266. | mhx6oo+mhx5oo=>mhx6o+mhx5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4267. | mhx6oo+mhx4oo=>mhx6o+mhx4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4268. | mhx6oo+mhx3oo=>mhx6o+mhx3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4269. | mhx6oo+mhx2oo=>mhx6o+mhx2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4270. | mhx6oo+mhxmoo=>mhx6o+mhxmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4271. | mhx5oo+mhx5oo=>mhx5o+mhx5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4272. | mhx5oo+mhx4oo=>mhx5o+mhx4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4273. | mhx5oo+mhx3oo=>mhx5o+mhx3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4274. | mhx5oo+mhx2oo=>mhx5o+mhx2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4275. | mhx5oo+mhxmoo=>mhx5o+mhxmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4276. | mhx4oo+mhx4oo=>mhx4o+mhx4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4277. | mhx4oo+mhx3oo=>mhx4o+mhx3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4278. | mhx4oo+mhx2oo=>mhx4o+mhx2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4279. | mhx4oo+mhxmoo=>mhx4o+mhxmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4280. | mhx3oo+mhx3oo=>mhx3o+mhx3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4281. | mhx3oo+mhx2oo=>mhx3o+mhx2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4282. | mhx3oo+mhxmoo=>mhx3o+mhxmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4283. | mhx2oo+mhx2oo=>mhx2o+mhx2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4284. | mhx2oo+mhxmoo=>mhx2o+mhxmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4285. | mhxmoo+mhxmoo=>mhxmo+mhxmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4286. | mhx6oo+ch3o2=>mhx6o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4287. | mhx5oo+ch3o2=>mhx5o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4288. | mhx4oo+ch3o2=>mhx4o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4289. | mhx3oo+ch3o2=>mhx3o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4290. | mhx2oo+ch3o2=>mhx2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4291. | mhxmoo+ch3o2=>mhxmo+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4292. | mhx6oo+ho2=mhx6ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4293. | mhx5oo+ho2=mhx5ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4294. | mhx4oo+ho2=mhx4ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4295. | mhx3oo+ho2=mhx3ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4296. | mhx2oo+ho2=mhx2ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4297. | mhxmoo+ho2=mhxmooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4298. | mhx6oo+h2o2=mhx6ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4299. | mhx5oo+h2o2=mhx5ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4300. | mhx4oo+h2o2=mhx4ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4301. | mhx3oo+h2o2=mhx3ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4302. | mhx2oo+h2o2=mhx2ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4303. | mhxmoo+h2o2=mhxmooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4304. | mhx6oo+mhx6j=mhx6o+mhx6o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4305. | mhx6oo+mhx5j=mhx6o+mhx5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4306. | mhx6oo+mhx4j=mhx6o+mhx4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4307. | mhx6oo+mhx3j=mhx6o+mhx3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4308. | mhx6oo+mhx2j=mhx6o+mhx2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4309. | mhx6oo+mhxmj=mhx6o+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4310. | mhx5oo+mhx5j=mhx5o+mhx5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4311. | mhx5oo+mhx4j=mhx5o+mhx4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4312. | mhx5oo+mhx3j=mhx5o+mhx3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4313. | mhx5oo+mhx2j=mhx5o+mhx2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4314. | mhx5oo+mhxmj=mhx5o+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4315. | mhx4oo+mhx4j=mhx4o+mhx4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4316. | mhx4oo+mhx3j=mhx4o+mhx3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4317. | mhx4oo+mhx2j=mhx4o+mhx2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4318. | mhx4oo+mhxmj=mhx4o+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4319. | mhx3oo+mhx3j=mhx3o+mhx3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4320. | mhx3oo+mhx2j=mhx3o+mhx2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4321. | mhx3oo+mhxmj=mhx3o+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4322. | mhx2oo+mhx2j=mhx2o+mhx2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4323. | mhx2oo+mhxmj=mhx2o+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4324. | mhxmoo+mhxmj=mhxmo+mhxmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4325. | mhx6oo+ch3=mhx6o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4326. | mhx5oo+ch3=mhx5o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4327. | mhx4oo+ch3=mhx4o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4328. | mhx3oo+ch3=mhx3o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4329. | mhx2oo+ch3=mhx2o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4330. | mhxmoo+ch3=mhxmo+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4331. | mhx6ooh5oo=>mhx5ooh6oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4332. | mhx5ooh6oo=>mhx6ooh5oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4333. | mhx5ooh4oo=>mhx4ooh5oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4334. | mhx4ooh5oo=>mhx5ooh4oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4335. | mhx4ooh3oo=>mhx3ooh4oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4336. | mhx3ooh4oo=>mhx4ooh3oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4337. | mhx3ooh2oo=>mhx2ooh3oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4338. | mhx2ooh3oo=>mhx3ooh2oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 4339. | mhx6ooh5oo=>mhx5ooh6*o+oh | 3.30E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 4340. | mhx6ooh4oo=>mhx4ooh6*o+oh | 5.70E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 4341. | mhx6ooh3oo=>mhx3ooh6*o+oh | 1.00E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4342. | mhx6ooh2oo=>mhx2ooh6*o+oh | 1.70E+07 | 1.0 | 24000.0 |
| 4343. | mhx5ooh6oo=>mhx5ooh6*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4344. | mhx5ooh4oo=>mhx4ooh5*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4345. | mhx5ooh3oo=>mhx3ooh5*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4346. | mhx5ooh2oo=>mhx2ooh5*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 4347. | mhx4ooh6oo=>mhx6ooh4*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4348. | mhx4ooh5oo=>mhx5ooh4*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4349. | mhx4ooh3oo=>mhx3ooh4*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4350. | mhx4ooh2oo=>mhx2ooh4*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4351. | mhx3ooh6oo=>mhx6ooh3*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 22000.0 |
| 4352. | mhx3ooh5oo=>mhx5ooh3*o+oh | 2.85E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 4353. | mhx3ooh4oo=>mhx4ooh3*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4354. | mhx3ooh2oo=>mhx2ooh3*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 4355. | mhx2ooh6oo=>mhx6ooh2*o+oh | 8.50E+06 | 1.0 | 16000.0 |
| 4356. | mhx2ooh5oo=>mhx5ooh2*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 17000.0 |
| 4357. | mhx2ooh4oo=>mhx4ooh2*o+oh | 2.85E+07 | 1.0 | 20000.0 |
| 4358. | mhx2ooh3oo=>mhx3ooh2*o+oh | 1.65E+09 | 1.0 | 27500.0 |
| 4359. | mhx2oohmoo=>mhxmooh2*o+oh | 5.00E+07 | 1.0 | 21700.0 |
| 4360. | mhxmooh2oo=>mhx2oohm*o+oh | 1.00E+08 | 1.0 | 28500.0 |
| 4361. | mhx6ooh=mhx6o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4362. | mhx5ooh=mhx5o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 4363. | mhx4ooh=mhx4o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 4364. | mhx3ooh=mhx3o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 4365. | mhx2ooh=mhx2o+oh | 5.95E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| 4366. | mhxmooh=mhxmo+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4367. | ch2o+mpe5j=mhx6o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4368. | ch3hco+mb4j=mhx5o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4369. | ch3+mpe5*o=mhx5o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4370. | c2h5hco+mp3j=mhx4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4371. | c2h5+mb4*o=mhx4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4372. | nc3h7hco+me2j=mhx3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4373. | nc3h7+mp3*o=mhx3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4374. | nc4h9hco+ch3oco=mhx2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4375. | pc4h9+me2*o=mhx2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4376. | ch2o+hxaoj=mhxmo | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4377. | mhx6*o+h=mhx6o | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 4378. | mhxm*o+h=mhxmo | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 4379. | mhxcy6o4+h=>mb4j*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 4380. | mhxcy6o4+h=>mpe4d+hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 4381. | mhxcy6o3+h=>mb4j3*o+c2h4+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 4382. | mhxcy6o3+h=>mb3d+ch2hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 4383. | mhxcy6o2+h=>mp2d+ch2ch2hco+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 4384. | mhxcy5o3+h=>mp3j*o+c3h6+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 4385. | mhxcy5o3+h=>mb3d+ch3co+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 4386. | mhxcy5o2+h=>mp2d+ch2coch3+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 4387. | mhxcy4o2+h=>mp2d+c2h5co+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 4388. | mhxcy2om+h=>c5h10co+ocho+h2 | 1.92E+09 | 1.5 | 2785.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4389. | mhxcy6o4+oh=>mb4j*o+c2h4+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4390. | mhxcy6o4+oh=>mpe4d+hco+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4391. | mhxcy6o3+oh=>mb4j3*o+c2h4+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4392. | mhxcy6o3+oh=>mb3d+ch2hco+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4393. | mhxcy6o2+oh=>mp2d+ch2ch2hco+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4394. | mhxcy5o3+oh=>mp3j*o+c3h6+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4395. | mhxcy5o3+oh=>mb3d+ch3co+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4396. | mhxcy5o2+oh=>mp2d+ch2coch3+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4397. | mhxcy4o2+oh=>mp2d+c2h5co+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4398. | mhxcy2om+oh=>c5h10co+ocho+h2o | 9.60E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 4399. | mhxcy6o4+ho2=>mb4j*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 4400. | mhxcy6o4+ho2=>mpe4d+hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 4401. | mhxcy6o3+ho2=>mb4j3*o+c2h4+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 4402. | mhxcy6o3+ho2=>mb3d+ch2hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 4403. | mhxcy6o2+ho2=>mp2d+ch2ch2hco+h2o2 | 1.00E+13 | 0.0 | 13260.0 |
| 4404. | mhxcy5o3+ho2=>mp3j*o+c3h6+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 4405. | mhxcy5o3+ho2=>mb3d+ch3co+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 4406. | mhxcy5o2+ho2=>mp2d+ch2coch3+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 4407. | mhxcy4o2+ho2=>mp2d+c2h5co+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 4408. | mhxcy2om+ho2=>c5h10co+ocho+h2o2 | 1.60E+13 | 0.0 | 14400.0 |
| 4409. | mhxcy6o4+ch3o=>mb4j*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4410. | mhxcy6o4+ch3o=>mpe4d+hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4411. | mhxcy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c2h4+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4412. | mhxcy6o3+ch3o=>mb3d+ch2hco+ch3oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4413. | mhxcy6o2+ch3o=>mp2d+ch2ch2hco+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4414. | mhxcy5o3+ch3o=>mp3j*o+c3h6+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4415. | mhxcy5o3+ch3o=>mb3d+ch3co+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4416. | mhxcy5o2+ch3o=>mp2d+ch2coch3+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4417. | mhxcy4o2+ch3o=>mp2d+c2h5co+ch3oh | 4.38E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4418. | mhxcy2om+ch3o=>c5h10co+ocho+ch3oh | 8.76E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4419. | mhxcy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4420. | mhxcy6o4+ch3o2=>mpe4d+hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4421. | mhxcy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c2h4+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4422. | mhxcy6o3+ch3o2=>mb3d+ch2hco+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4423. | mhxcy6o2+ch3o2=>mp2d+ch2ch2hco+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4424. | mhxcy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c3h6+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4425. | mhxcy5o3+ch3o2=>mb3d+ch3co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4426. | mhxcy5o2+ch3o2=>mp2d+ch2coch3+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4427. | mhxcy4o2+ch3o2=>mp2d+c2h5co+ch3o2h | 8.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 4428. | mhxcy2om+ch3o2=>c5h10co+ocho+ch3o2h | 1.60E+13 | 0.0 | 17700.0 |
| 4429. | mhx5ooh6*o=>mpe5*o+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4430. | mhx4ooh6*o=>mb4*o+ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4431. | mhx3ooh6*o=>me2j+choc2h4cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4432. | mhx2ooh6*o=>ch3oco+choc3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4433. | mhx6ooh5*o=>mpe5j*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4434. | mhx4ooh5*o=>mb4*o+ch3co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4435. | mhx3ooh5*o=>mp3*o+ch2coch3+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4436. | mhx3ooh5*o=>me2j+c4ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4437. | mhx2ooh5*o=>ch3oco+c5ald4oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4438. | mhx6ooh4*o=>mpe5j4*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4439. | mhx5ooh4*o=>mb4j*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4440. | mhx3ooh4*o=>mp3*o+c2h5co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4441. | mhx3ooh4*o=>me2j+c4ald2oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4442. | mhx2ooh4*o=>ch3oco+c5ald3oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4443. | mhx6ooh3*o=>mpe5j3*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4444. | mhx5ooh3*o=>mb4j3*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4445. | mhx4ooh3*o=>mp3j*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4446. | mhx2ooh3*o=>ch3oco+c5ald2oxo+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4447. | mhx6ooh2*o=>mpe5j2*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4448. | mhx5ooh2*o=>mb4j2*o+ch3hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4449. | mhx4ooh2*o=>mp3j2*o+c2h5hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4450. | mhx3ooh2*o=>me2j*o+nc3h7hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4451. | mhxmooh2*o=>hxaoj2*o+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4452. | mhx2oohm*o=>chooco+nc4h9hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 4453. | mhx5d+o=mhx5d4j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4454. | mhx5d+o=mhx5d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4455. | mhx5d+h=mhx5d4j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4456. | mhx5d+h=mhx5d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4457. | mhx5d+oh=mhx5d4j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4458. | mhx5d+oh=mhx5d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4459. | mhx5d+ho2=mhx5d4j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4460. | mhx5d+ho2=mhx5d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4461. | mhx5d+ch3o=mhx5d4j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4462. | mhx5d+ch3o=mhx5d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4463. | mhx5d=me2j+Cc4h7-1 | 2.50E+16 | 0.0 | 68000.0 |
| 4464. | mhx5d=mp3j+ac3h5 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| 4465. | c2h3+mb4j=mhx5d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4466. | mhx5d+o2=mhx5d4j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4467. | mhx5d+o2=mhx5d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 4468. | mhx5d+o=mpe5j+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 4469. | mhx5d4j+h=mhx5d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4470. | mhx5d2j+h=mhx5d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4471. | mhx5d4j=c4h6+me2j | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 4472. | mhx5d2j=ac3h5+mp2d | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 4473. | c5h8co+ch3o=mhx5d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4474. | mhx4d+o=mhx5d4j+oh | 1.74E+11 | 0.7 | 5900.0 |
| 4475. | mhx4d+o=mhx4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4476. | mhx4d+o=mhx4d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4477. | mhx4d+h=mhx5d4j+h2 | 1.74E+05 | 2.5 | 2510.0 |
| 4478. | mhx4d+h=mhx4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4479. | mhx4d+h=mhx4d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4480. | mhx4d+oh=mhx5d4j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -298.0 |
| 4481. | mhx4d+oh=mhx4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4482. | mhx4d+oh=mhx4d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4483. | mhx4d+ho2=mhx5d4j+h2o2 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 |
| 4484. | mhx4d+ho2=mhx4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4485. | mhx4d+ho2=mhx4d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4486. | mhx4d+ch3o=mhx5d4j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4487. | mhx4d+ch3o=mhx4d3j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4488. | mhx4d+ch3o=mhx4d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4489. | mhx4d+o2=mhx5d4j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4490. | mhx4d+o2=mhx4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4491. | mhx4d+o2=mhx4d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 4492. | mhx4d+o=mb4j+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 4493. | mhx4d3j+h=mhx4d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4494. | mhx4d3j=c5h8-13+ch3oco | 1.30E+13 | 0.0 | 33900.0 |
| 4495. | mhx4d2j=mp2d+ac3h5 | 1.30E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| 4496. | c5h8co+ch3o=mhx4d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4497. | mhx3d+o=mhx4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4498. | mhx3d+o=mhx3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4499. | mhx3d+h=mhx4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4500. | mhx3d+h=mhx3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4501. | mhx3d+oh=mhx4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4502. | mhx3d+oh=mhx3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4503. | mhx3d+ho2=mhx4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4504. | mhx3d+ho2=mhx3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4505. | mhx3d+ch3o=mhx4d3j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4506. | mhx3d+ch3o=mhx3d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4507. | mhx3d+o2=mhx4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4508. | mhx3d+o2=mhx3d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 4509. | mhx3d+o=mp3j+c2h5co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 4510. | mhx3d2j+h=mhx3d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4511. | c5h8co+ch3o=mhx3d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4512. | mhx2d+o=mhx3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4513. | mhx2d+h=mhx3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4514. | mhx2d+oh=mhx3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4515. | mhx2d+ho2=mhx3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4516. | mhx2d+ch3o=mhx3d2j+ch3oh | 1.88E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4517. | mhx2d+o2=mhx3d2j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4518. | mhx2d+o=me2j+nc3h7co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 4519. | mhx5d+oh=mhx5oh6j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 4520. | mhx4d+oh=mhx4oh5j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 4521. | mhx3d+oh=mhx3oh4j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 4522. | mhx2d+oh=mhx2oh3j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 4523. | mhx5oh6j+o2=mhx5oh6oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 4524. | mhx4oh5j+o2=mhx4oh5oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 4525. | mhx3oh4j+o2=mhx3oh4oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 4526. | mhx2oh3j+o2=mhx2oh3oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 4527. | mhx5oh6oo=>mpe5*o+oh+ch2o | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 4528. | mhx4oh5oo=>mb4*o+oh+ch3hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 4529. | mhx3oh4oo=>mp3*o+oh+c2h5hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 4530. | mhx2oh3oo=>me2*o+oh+nc3h7hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 4531. | hco+mpe5j=mhx6*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4532. | mhx6*o+o2=mhx6j*o+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 4533. | mhx6*o+h=mhx6j*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 4534. | mhx6*o+oh=mhx6j*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 4535. | mhx6*o+o=mhx6j*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 4536. | mhx6*o+ho2=mhx6j*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 4537. | mhx6j*o=>mpe5j+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 4538. | mhx6j5*o=>ch2co+mb4j | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 4539. | hco+mpe5j4*o=mhx6*o4*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4540. | mhx6j5*o+o2=mhx6oo5*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4541. | mhx6oo5*o+ho2=mhx6ooh5*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4542. | mhx6ooh5*o=mhx6o5*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4543. | mhx6oo5*o+ch3o2=>mhx6o5*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4544. | mhx6oo3*o+ho2=mhx6ooh3*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4545. | mhx6ooh3*o=mhx6o3*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4546. | mhx6oo3*o+ch3o2=>mhx6o3*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4547. | mhx6j4*o+o2=mhx6oo4*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4548. | mhx6oo4*o+ho2=mhx6ooh4*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4549. | mhx6ooh4*o=mhx6o4*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4550. | mhx6oo4*o+ch3o2=>mhx6o4*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4551. | mhx6j3*o+o2=mhx6oo3*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4552. | ch2o+mpe5j*o=mhx6o5*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4553. | ch2o+mpe5j4*o=mhx6o4*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4554. | mhx5d3d+oh=>h2o+c2h2+ac3h5+ch2o+co | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4555. | mhx5d3d+h=>h2+c2h2+ac3h5+ch2o+co | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4556. | mhx6*o4*o+h=mhx6j*o4*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 4557. | mhx6*o4*o+oh=mhx6j*o4*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 4558. | mhx6*o4*o+o=mhx6j*o4*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 4559. | mhx6*o4*o+ho2=mhx6j*o4*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 4560. | mhx6*o4*o+ch3=mhx6j*o4*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 4561. | mhx6*o4*o+ch3o=mhx6j*o4*o+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 4562. | mhx6*o4*o+ch3o2=mhx6j*o4*o+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 4563. | mhx6j*o4*o=co+mpe5j4*o | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 4564. | mpe=mpe5j+h | 7.90E+15 | 0.0 | 97970.0 |
| 4565. | mpe=mpe4j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 4566. | mpe=mpe3j+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 4567. | mpe2j+h=mpe | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 4568. | mpe=mpemj+h | 7.90E+15 | 0.0 | 93970.0 |
| 4569. | mpe=mb4j+ch3 | 5.00E+16 | 0.0 | 84660.0 |
| 4570. | mpe=mp3j+c2h5 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 4571. | mpe=me2j+nc3h7 | 7.94E+16 | 0.0 | 80280.0 |
| 4572. | mpe=ch3oco+pc4h9 | 1.13E+16 | 0.0 | 77700.0 |
| 4573. | nc4h9co+ch3o=mpe | 1.50E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4574. | mpe=peaoj+ch3 | 3.16E+16 | 0.0 | 83070.0 |
| 4575. | mpe+o2=mpe5j+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 4576. | mpe+o2=mpe4j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 4577. | mpe+o2=mpe3j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 4578. | mpe+o2=mpe2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 4579. | mpe+o2=mpemj+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 44910.0 |
| 4580. | mpe+h=mpe5j+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| 4581. | mpe+h=mpe4j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 4582. | mpe+h=mpe3j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 4583. | mpe+h=mpe2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4584. | mpe+h=mpemj+h2 | 1.44E+13 | 0.0 | 6095.0 |
| 4585. | mpe+o=mpe5j+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 4586. | mpe+o=mpe4j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 4587. | mpe+o=mpe3j+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 4588. | mpe+o=mpe2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4589. | mpe+o=mpemj+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 4590. | mpe+oh=mpe5j+h2o | 5.25E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| 4591. | mpe+oh=mpe4j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 4592. | mpe+oh=mpe3j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 4593. | mpe+oh=mpe2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4594. | mpe+oh=mpemj+h2o | 7.10E+06 | 1.8 | -596.0 |
| 4595. | mpe+ho2=mpe5j+h2o2 | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4596. | mpe+ho2=mpe4j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4597. | mpe+ho2=mpe3j+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4598. | mpe+ho2=mpe2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4599. | mpe+ho2=mpemj+h2o2 | 9.64E+10 | 0.0 | 12580.0 |
| 4600. | mpe+hco=mpe5j+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 4601. | mpe+hco=mpe4j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 4602. | mpe+hco=mpe3j+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17000.0 |
| 4603. | mpe+hco=mpe2j+ch2o | 1.14E+09 | 1.3 | 15500.0 |
| 4604. | mpe+hco=mpemj+ch2o | 1.02E+05 | 2.5 | 18500.0 |
| 4605. | mpe+ch3=mpe5j+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 4606. | mpe+ch3=mpe4j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 4607. | mpe+ch3=mpe3j+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 4608. | mpe+ch3=mpe2j+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4609. | mpe+ch3=mpemj+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 4610. | mpe+ch3o=mpe5j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4611. | mpe+ch3o=mpe4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4612. | mpe+ch3o=mpe3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4613. | mpe+ch3o=mpe2j+ch3oh | 1.78E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 4614. | mpe+ch3o=mpemj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4615. | mpe+ch2oh=mpe5j+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4616. | mpe+ch2oh=mpe4j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4617. | mpe+ch2oh=mpe3j+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4618. | mpe+ch2oh=mpe2j+ch3oh | 3.60E+01 | 3.0 | 10000.0 |
| 4619. | mpe+ch2oh=mpemj+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4620. | mpe+ch3o2=mpe5j+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4621. | mpe+ch3o2=mpe4j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4622. | mpe+ch3o2=mpe3j+ch3o2h | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4623. | mpe+ch3o2=mpe2j+ch3o2h | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4624. | mpe+ch3o2=mpemj+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4625. | mpe+c2h3=mpe5j+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 4626. | mpe+c2h3=mpe4j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 4627. | mpe+c2h3=mpe3j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 4628. | mpe+c2h3=mpe2j+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| 4629. | mpe+c2h3=mpemj+c2h4 | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 4630. | mpe+c2h5=mpe5j+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 4631. | mpe+c2h5=mpe4j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 4632. | mpe+c2h5=mpe3j+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4633. | mpe+c2h5=mpe2j+c2h6 | 2.20E+00 | 3.5 | 4140.0 |
| 4634. | mpe+c2h5=mpemj+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 4635. | mpe+ac3h5=mpe5j+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4636. | mpe+ac3h5=mpe4j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4637. | mpe+ac3h5=mpe3j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4638. | mpe+ac3h5=mpe2j+c3h6 | 8.00E+01 | 3.3 | 17170.0 |
| 4639. | mpe+ac3h5=mpemj+c3h6 | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4640. | mpe+mpe2j=mpe5j+mpe | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4641. | mpe+mpe2j=mpe4j+mpe | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4642. | mpe+mpe2j=mpe3j+mpe | 8.00E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 4643. | mpe+mpe2j=mpemj+mpe | 1.20E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 4644. | mpe3j=mpemj | 2.50E+07 | 1.0 | 14500.0 |
| 4645. | mpe2j=mpe5j | 1.50E+08 | 1.0 | 19800.0 |
| 4646. | mpe2j=mpemj | 1.50E+08 | 1.0 | 19800.0 |
| 4647. | mpemj=mpe4j | 2.90E+06 | 1.0 | 17400.0 |
| 4648. | mpe5j=c2h4+mp3j | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4649. | mpe4j=c3h6+me2j | 2.00E+13 | 0.0 | 24700.0 |
| 4650. | mpe3j=c4h8+ch3oco | 2.00E+13 | 0.0 | 30500.0 |
| 4651. | mpe3j=ch3+mb3d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4652. | mpe2j=c2h5+mp2d | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4653. | c4h8co+ch3o=mpe2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4654. | mpemj=ch2o+nc4h9co | 1.64E+22 | -2.3 | 31950.0 |
| 4655. | co2+pc4h9=peaoj | 1.00E+11 | 0.0 | 39360.0 |
| 4656. | mpe5j=h+mpe4d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4657. | mpe4j=h+mpe4d | 3.00E+13 | 0.0 | 39000.0 |
| 4658. | mpe4j=h+mpe3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4659. | mpe3j=h+mpe3d | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4660. | mpe3j=h+mpe2d | 3.20E+13 | 0.0 | 34800.0 |
| 4661. | mpe2j=h+mpe2d | 3.00E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| 4662. | mpe5j+o2=mpe4d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4663. | mpe4j+o2=mpe4d+ho2 | 8.07E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4664. | mpe4j+o2=mpe3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4665. | mpe3j+o2=mpe3d+ho2 | 1.95E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4666. | mpe3j+o2=mpe2d+ho2 | 2.60E+11 | 0.0 | 2500.0 |
| 4667. | mpe2j+o2=mpe2d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 |
| 4668. | mpe5j*o=mb4j+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 4669. | mpe4d+o=mpe4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4670. | mpe4d+o=mpe4d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4671. | mpe4d+h=mpe4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4672. | mpe4d+h=mpe4d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4673. | mpe4d+oh=mpe4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4674. | mpe4d+oh=mpe4d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4675. | mpe4d+ho2=mpe4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4676. | mpe4d+ho2=mpe4d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4677. | mpe4d+oh=mb4j+ch2o | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| 4678. | mpe4d+oh=ch3+mb4*o | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4679. | mpe4d=me2j+ac3h5 | 2.50E+16 | 0.0 | 68000.0 |
| 4680. | c2h3+mp3j=mpe4d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4681. | mpe4d+o2=mpe4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4682. | mpe4d+o2=mpe4d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 4683. | mpe4d+o=mb4j+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 4684. | mpe4d3j+h=mpe4d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4685. | mpe4d2j+h=mpe4d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4686. | mpe4d3j=ch3oco+c4h6 | 1.30E+13 | 0.0 | 35900.0 |
| 4687. | mpe4d2j=mp2d+c2h3 | 1.00E+12 | 0.0 | 50000.0 |
| 4688. | c4h6co+ch3o=mpe4d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4689. | mpe3d+o=mpe4d3j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4690. | mpe3d+o=mpe3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4691. | mpe3d+h=mpe4d3j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4692. | mpe3d+h=mpe3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4693. | mpe3d+oh=mpe4d3j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4694. | mpe3d+oh=mpe3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4695. | mpe3d+ho2=mpe4d3j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4696. | mpe3d+ho2=mpe3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4697. | mpe3d+oh=ch3hco+mp3j | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4698. | mpe3d+oh=c2h5+mp3*o | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4699. | mpe3d+o2=mpe4d3j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4700. | mpe3d+o2=mpe3d2j+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37300.0 |
| 4701. | mpe3d+o=mp3j+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 4702. | mpe3d2j+h=mpe3d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4703. | c4h6co+ch3o=mpe3d2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4704. | mpe2d+o=mpe3d2j+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4705. | mpe2d+h=mpe3d2j+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4706. | mpe2d+oh=mpe3d2j+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4707. | mpe2d+ho2=mpe3d2j+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4708. | mpe2d+o2=mpe3d2j+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 37000.0 |
| 4709. | mpe2d+o=me2j+c2h5co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 4710. | mpe2d+oh=c2h5hco+me2j | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4711. | mpe2d+oh=nc3h7+me2*o | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4712. | hco+mb4j=mpe5*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4713. | mpe5*o+o2=mpe5j*o+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 4714. | mpe5*o+h=mpe5j*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 4715. | mpe5*o+oh=mpe5j*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 4716. | mpe5*o+o=mpe5j*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 4717. | mpe5*o+ho2=mpe5j*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 4718. | mpe5j2*o=c2h4+mp3j2*o | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4719. | mhx6j3*o=c2h4+mb4j3*o | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4720. | mhp7j4*o=c2h4+mpe5j4*o | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 4721. | mpe5j4*o=>ch2co+mp3j | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 4722. | mb4j3*o=>ch2co+me2j | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 4723. | ch2o+mpe5j3*o=mhx6o3*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4724. | mpe5j4*o+o2=mpe5oo4*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4725. | mpe5j3*o+o2=mpe5oo3*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 4726. | mpe5oo4*o+ho2=mpe5ooh4*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4727. | mpe5oo3*o+ho2=mpe5ooh3*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 4728. | mpe5*o4*o+h=mpe5j*o4*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 4729. | mpe5*o4*o+oh=mpe5j*o4*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 4730. | mpe5*o4*o+o=mpe5j*o4*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 4731. | mpe5*o4*o+ho2=mpe5j*o4*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 4732. | mpe5*o4*o+ch3=mpe5j*o4*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 4733. | mpe5*o4*o+ch3o=mpe5j*o4*o+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 4734. | mpe5*o4*o+ch3o2=mpe5j*o4*o+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 4735. | mpe5j*o4*o=co+mb4j*o | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 4736. | mpe5*o3*o+h=mpe5j*o3*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 4737. | mpe5*o3*o+oh=mpe5j*o3*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 4738. | mpe5*o3*o+o=mpe5j*o3*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 4739. | mpe5*o3*o+ho2=mpe5j*o3*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 4740. | mpe5*o3*o+ch3=mpe5j*o3*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 4741. | mpe5*o3*o+ch3o=mpe5j*o3*o+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 4742. | mpe5*o3*o+ch3o2=mpe5j*o3*o+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 4743. | mpe5j*o3*o=co+mb4j3*o | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 4744. | hco+mb4j3*o=mpe5*o3*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4745. | mpe5*o3*o+h=>co+ch2co+me2j+h2 | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 4746. | mpe5ooh3*o=mpe5o3*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4747. | ch2o+mb4j3*o=mpe5o3*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4748. | ch2o+mb4j*o=mpe5o4*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4749. | mpe5ooh4*o=mpe5o4*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4750. | mpe5oo4*o+ch3o2=>mpe5o4*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4751. | mpe5oo3*o+ch3o2=>mpe5o3*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4752. | mpe4d2d+oh=>h2o+nc4h5+ch2o+co | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4753. | mpe4d2d+h=>h2+nc4h5+ch2o+co | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4754. | mb4j+h=mb | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4755. | mb3j+h=mb | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 4756. | mb2j+h=mb | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 4757. | mbmj+h=mb | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 4758. | mp3j+ch3=mb | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4759. | baoj+ch3=mb | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4760. | me2j+c2h5=mb | 8.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4761. | ch3oco+nc3h7=mb | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4762. | nc3h7co+ch3o=mb | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4763. | mb+c2h3=c2h4+mb4j | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 4764. | mb+c2h5=c2h6+mb4j | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 4765. | mb+ch3=ch4+mb4j | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 4766. | mb+ch3o=ch3oh+mb4j | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4767. | mb+ch3o2=ch3o2h+mb4j | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4768. | mb+h=h2+mb4j | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| 4769. | mb+ho2=h2o2+mb4j | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4770. | mb+o=oh+mb4j | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 4771. | mb+o2=ho2+mb4j | 2.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 4772. | mb+oh=h2o+mb4j | 5.25E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| 4773. | mb+mb4oo=mb4ooh+mb4j | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4774. | mb+mb3oo=mb3ooh+mb4j | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4775. | mb+mb2oo=mb2ooh+mb4j | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4776. | mb+mbmoo=mbmooh+mb4j | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4777. | mb+c2h3=c2h4+mb3j | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 4778. | mb+c2h5=c2h6+mb3j | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 4779. | mb+ch3=ch4+mb3j | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 4780. | mb+ch3o=ch3oh+mb3j | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4781. | mb+ch3o2=ch3o2h+mb3j | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4782. | mb+h=h2+mb3j | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 4783. | mb+ho2=h2o2+mb3j | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4784. | mb+o=oh+mb3j | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 4785. | mb+o2=ho2+mb3j | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 4786. | mb+oh=h2o+mb3j | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 4787. | mb+mb4oo=mb4ooh+mb3j | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4788. | mb+mb3oo=mb3ooh+mb3j | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4789. | mb+mb2oo=mb2ooh+mb3j | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4790. | mb+mbmoo=mbmooh+mb3j | 1.87E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 4791. | mb+c2h3=c2h4+mb2j | 4.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| 4792. | mb+c2h5=c2h6+mb2j | 2.00E+11 | 0.0 | 7900.0 |
| 4793. | mb+ch3=ch4+mb2j | 2.00E+11 | 0.0 | 7900.0 |
| 4794. | mb+ch3o=ch3oh+mb2j | 3.80E+10 | 0.0 | 2800.0 |
| 4795. | mb+ch3o2=ch3o2h+mb2j | 4.00E+12 | 0.0 | 14000.0 |
| 4796. | mb+h=h2+mb2j | 2.52E+14 | 0.0 | 7300.0 |
| 4797. | mb+ho2=h2o2+mb2j | 4.32E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 4798. | mb+o=oh+mb2j | 2.20E+13 | 0.0 | 32800.0 |
| 4799. | mb+o2=ho2+mb2j | 4.00E+13 | 0.0 | 32800.0 |
| 4800. | mb+oh=h2o+mb2j | 1.15E+11 | 0.5 | 63.0 |
| 4801. | mb+mb4oo=mb4ooh+mb2j | 2.16E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 4802. | mb+mb3oo=mb3ooh+mb2j | 2.16E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 4803. | mb+mb2oo=mb2ooh+mb2j | 2.16E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 4804. | mb+mbmoo=mbmooh+mb2j | 2.16E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 4805. | mb+c2h3=c2h4+mbmj | 5.01E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 4806. | mb+c2h5=c2h6+mbmj | 5.01E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 4807. | mb+ch3=ch4+mbmj | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 4808. | mb+ch3o=ch3oh+mbmj | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 4809. | mb+ch3o2=ch3o2h+mbmj | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4810. | mb+h=h2+mbmj | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| 4811. | mb+ho2=h2o2+mbmj | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4812. | mb+o=oh+mbmj | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 4813. | mb+o2=mbmj+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 44910.0 |
| 4814. | mb+oh=h2o+mbmj | 5.25E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| 4815. | mb+mb4oo=mb4ooh+mbmj | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4816. | mb+mb3oo=mb3ooh+mbmj | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4817. | mb+mb2oo=mb2ooh+mbmj | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4818. | mb+mbmoo=mbmooh+mbmj | 2.80E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 4819. | co2+nc3h7=baoj | 1.00E+11 | 0.0 | 39360.0 |
| 4820. | c2h5chco+ch3o=mb2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4821. | mb2d+h=mb2j | 1.00E+13 | 0.0 | 2900.0 |
| 4822. | mp2d+ch3=mb2j | 1.00E+11 | 0.0 | 7600.0 |
| 4823. | c3h6+ch3oco=mb3j | 1.06E+11 | 0.0 | 7350.0 |
| 4824. | mb2d+h=mb3j | 1.00E+13 | 0.0 | 2900.0 |
| 4825. | mb3d+h=mb3j | 1.00E+13 | 0.0 | 1200.0 |
| 4826. | c2h4+me2j=mb4j | 2.00E+11 | 0.0 | 7600.0 |
| 4827. | mb3d+h=mb4j | 1.00E+13 | 0.0 | 2900.0 |
| 4828. | ch2co+ch3o=me2j | 5.00E+11 | 0.0 | -1000.0 |
| 4829. | mb4j=mb2j | 1.79E+09 | 0.8 | 31736.3 |
| 4830. | mb4j=mb3j | 1.64E+10 | 0.9 | 39319.5 |
| 4831. | mb4j=mbmj | 4.55E+09 | -0.5 | 18822.5 |
| 4832. | mb3j=mbmj | 9.26E+10 | -0.7 | 13897.0 |
| 4833. | mb3j=mb2j | 1.41E+10 | 0.9 | 39467.5 |
| 4834. | mb2j=mbmj | 8.50E+11 | -0.5 | 21614.5 |
| 4835. | mb4j+o2=mb4oo | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4836. | mbmj+o2=mbmoo | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4837. | mb3j+o2=mb3oo | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4838. | mb2j+o2=mb2oo | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4839. | mb4j+o2=mb3d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4840. | mb3j+o2=mb3d+ho2 | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 4841. | mb4oo+mb4j=mb4o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4842. | mb4oo+mb3j=mb4o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4843. | mb4oo+mb2j=mb4o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4844. | mb4oo+mbmj=mb4o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4845. | mb3oo+mb4j=mb3o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4846. | mb3oo+mb3j=mb3o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4847. | mb3oo+mb2j=mb3o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4848. | mb3oo+mbmj=mb3o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4849. | mb2oo+mb4j=mb2o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4850. | mb2oo+mb3j=mb2o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4851. | mb2oo+mb2j=mb2o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4852. | mb2oo+mbmj=mb2o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4853. | mbmoo+mb4j=mbmo+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4854. | mbmoo+mb3j=mbmo+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4855. | mbmoo+mb2j=mbmo+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4856. | mbmoo+mbmj=mbmo+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4857. | c2h5o2+mb2j=c2h5o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4858. | c2h5o2+mb3j=c2h5o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4859. | c2h5o2+mb4j=c2h5o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4860. | c2h5o2+mbmj=c2h5o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4861. | ch3o2+mb2j=ch3o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4862. | ch3o2+mb3j=ch3o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4863. | ch3o2+mb4j=ch3o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4864. | ch3o2+mbmj=ch3o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4865. | ho2+mb2j=oh+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4866. | ho2+mb3j=oh+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4867. | ho2+mb4j=oh+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4868. | ho2+mbmj=oh+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4869. | ic3h7o2+mb2j=ic3h7o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4870. | ic3h7o2+mb3j=ic3h7o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4871. | ic3h7o2+mb4j=ic3h7o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4872. | ic3h7o2+mbmj=ic3h7o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4873. | nc3h7o2+mb2j=nc3h7o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4874. | nc3h7o2+mb3j=nc3h7o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4875. | nc3h7o2+mb4j=nc3h7o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4876. | nc3h7o2+mbmj=nc3h7o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4877. | nc3h7co+ch2o=mbmj | 2.00E+12 | 0.0 | 24000.0 |
| 4878. | mb2d+ch3=c5h7o2+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 7300.0 |
| 4879. | mb3d+ch3=c5h7o2+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 7300.0 |
| 4880. | mb2d+h=c5h7o2+h2 | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| 4881. | mb3d+h=c5h7o2+h2 | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| 4882. | c5h7o2+oh=mb2d+o | 7.00E+11 | 0.0 | 29900.0 |
| 4883. | c5h7o2+oh=mb3d+o | 7.00E+11 | 0.0 | 29900.0 |
| 4884. | mb2d+oh=c5h7o2+h2o | 3.00E+13 | 0.0 | 1230.0 |
| 4885. | mb3d+oh=c5h7o2+h2o | 3.00E+13 | 0.0 | 1230.0 |
| 4886. | mb2d+ho2=c5h7o2+h2o2 | 1.50E+11 | 0.0 | 14190.0 |
| 4887. | mb3d+ho2=>c5h7o2+h2o2 | 1.50E+11 | 0.0 | 14190.0 |
| 4888. | mb3d+oh=mb3oh4j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 4889. | mb2d+oh=mb2oh3j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 4890. | mp2d+oh=mp2oh3j | 2.76E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 4891. | mb3d+o=mp3j+hco | 1.58E+07 | 1.8 | -1216.0 |
| 4892. | mb2d+o=me2j+ch3co | 1.58E+07 | 1.8 | -1216.0 |
| 4893. | mp2d+o=me2j+hco | 1.58E+07 | 1.8 | -1216.0 |
| 4894. | mb3d+o=me2j+ch2hco | 2.50E+07 | 1.8 | 76.0 |
| 4895. | mb3d+o=>acrol+h+ch3oco | 2.50E+07 | 1.8 | 76.0 |
| 4896. | mb2d+o=ch3oco+ch3chcho | 5.01E+07 | 1.8 | 76.0 |
| 4897. | ch3+mp2d3j=mb2d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4898. | c2h3+me2j=mb3d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4899. | mb3oh4j+o2=mb3oh4oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 4900. | mb2oh3j+o2=mb2oh3oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 4901. | mp2oh3j+o2=mp2oh3oo | 1.00E+12 | 0.0 | -1100.0 |
| 4902. | mb3oh4oo=>mp3*o+oh+ch2o | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 4903. | mb2oh3oo=>me2*o+oh+ch3hco | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 4904. | mp2oh3oo=>me2*o+oh+ch2o | 1.00E+12 | 0.0 | 28680.0 |
| 4905. | mb4oo+ch3=ch3o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4906. | mb4oo+c2h5=c2h5o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4907. | mb4oo+ic3h7=ic3h7o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4908. | mb4oo+nc3h7=nc3h7o+mb4o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4909. | mb3oo+ch3=ch3o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4910. | mb3oo+c2h5=c2h5o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4911. | mb3oo+ic3h7=ic3h7o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4912. | mb3oo+nc3h7=nc3h7o+mb3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4913. | mb2oo+ch3=ch3o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4914. | mb2oo+c2h5=c2h5o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4915. | mb2oo+ic3h7=ic3h7o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4916. | mb2oo+nc3h7=nc3h7o+mb2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4917. | mbmoo+ch3=ch3o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4918. | mbmoo+c2h5=c2h5o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4919. | mbmoo+ic3h7=ic3h7o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4920. | mbmoo+nc3h7=nc3h7o+mbmo | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 4921. | mb2oo=mb2ooh3j | 1.09E+12 | 0.0 | 29206.5 |
| 4922. | mb2oo=mb2ooh4j | 6.10E+10 | 0.0 | 25076.0 |
| 4923. | mb2oo=mb2oohmj | 3.16E+09 | 0.0 | 21803.5 |
| 4924. | mb3oo=mb3ooh2j | 2.84E+12 | 0.0 | 27789.0 |
| 4925. | mb3oo=mb3ooh4j | 8.67E+11 | 0.0 | 30876.0 |
| 4926. | mb4oo=mb4ooh2j | 2.00E+11 | 0.0 | 21989.0 |
| 4927. | mb4oo=mb4ooh3j | 1.09E+12 | 0.0 | 29206.5 |
| 4928. | mbmoo=mbmooh2j | 1.46E+10 | 0.0 | 19189.0 |
| 4929. | mb4oo+ho2=mb4ooh+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| 4930. | mb3oo+ho2=mb3ooh+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| 4931. | mb2oo+ho2=mb2ooh+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| 4932. | mbmoo+ho2=mbmooh+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| 4933. | mb4oo+h2o2=mb4ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4934. | mb3oo+h2o2=mb3ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4935. | mb2oo+h2o2=mb2ooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4936. | mbmoo+h2o2=mbmooh+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 4937. | mb4oo+ch3o2=>mb4o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4938. | mb3oo+ch3o2=>mb3o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4939. | mb2oo+ch3o2=>mb2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4940. | mbmoo+ch3o2=>mbmo+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4941. | c2h5o2+mb4oo=>c2h5o+mb4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4942. | c2h5o2+mb3oo=>c2h5o+mb3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4943. | c2h5o2+mb2oo=>c2h5o+mb2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4944. | c2h5o2+mbmoo=>c2h5o+mbmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4945. | ic3h7o2+mb4oo=>ic3h7o+mb4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4946. | ic3h7o2+mb3oo=>ic3h7o+mb3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4947. | ic3h7o2+mb2oo=>ic3h7o+mb2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4948. | ic3h7o2+mbmoo=>ic3h7o+mbmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4949. | mb2oo+mb2oo=>o2+mb2o+mb2o | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4950. | mb2oo+mb3oo=>mb2o+mb3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4951. | mb2oo+mb4oo=>mb2o+mb4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4952. | mb2oo+mbmoo=>mb2o+mbmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4953. | mb3oo+mb3oo=>o2+mb3o+mb3o | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4954. | mb3oo+mb4oo=>mb3o+mb4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4955. | mb3oo+mbmoo=>mb3o+mbmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4956. | mb4oo+mb4oo=>o2+mb4o+mb4o | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4957. | mb4oo+mbmoo=>mb4o+mbmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4958. | mbmoo+mbmoo=>o2+mbmo+mbmo | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4959. | nc3h7o2+mb4oo=>nc3h7o+mb4o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4960. | nc3h7o2+mb3oo=>nc3h7o+mb3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4961. | nc3h7o2+mb2oo=>nc3h7o+mb2o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4962. | nc3h7o2+mbmoo=>nc3h7o+mbmo+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 4963. | mb4ooh=mb4o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4964. | mb3ooh=mb3o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 4965. | mb2ooh=mb2o+oh | 5.95E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| 4966. | mbmooh=mbmo+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 4967. | ch2o+mp3j=mb4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4968. | ch3hco+me2j=mb3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4969. | me2*o+c2h5=mb2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4970. | mbm*o+h=mbmo | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 4971. | mb4*o+h=mb4o | 6.63E+09 | 1.1 | 4226.0 |
| 4972. | mp3*o+ch3=mb3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4973. | ch2o+baoj=mbmo | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4974. | c2h5hco+ch3oco=mb2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4975. | ch2o+mp3j*o=mb4o3*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 4976. | mb2oohmj=>mbcy2om+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4977. | mb2ooh4j=>mbcy4o2+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 4978. | mb2ooh3j=>mbcy3o2+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 4979. | mb3ooh2j=>mbcy3o2+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 4980. | mb3ooh4j=>mbcy4o3+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 4981. | mb4ooh2j=>mbcy4o2+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| 4982. | mb4ooh3j=>mbcy4o3+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| 4983. | mbmooh2j=>mbcy2om+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| 4984. | mb3d+ho2=mb4ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4985. | mb2d+ho2=mb3ooh2j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4986. | mb3d+ho2=mb3ooh4j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4987. | mb2d+ho2=mb2ooh3j | 1.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 4988. | mb2ooh4j=>me2*o+c2h4+oh | 5.92E+19 | -1.9 | 30290.0 |
| 4989. | mb4ooh2j=>mp2d+ch2o+oh | 1.02E+20 | -1.6 | 33380.0 |
| 4990. | mb2ooh3j+o2=mb2ooh3oo | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4991. | mb2ooh4j+o2=mb2ooh4oo | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4992. | mb2oohmj+o2=mb2oohmoo | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4993. | mb3ooh2j+o2=mb3ooh2oo | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4994. | mb3ooh4j+o2=mb3ooh4oo | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 4995. | mb4ooh2j+o2=mb4ooh2oo | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4996. | mb4ooh3j+o2=mb4ooh3oo | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4997. | mbmooh2j+o2=mbmooh2oo | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4998. | mb2ooh3oo=mb3ooh2*o+oh | 1.42E+12 | 0.0 | 26151.0 |
| 4999. | mb2ooh4oo=mb4ooh2*o+oh | 9.98E+10 | 0.0 | 20351.0 |
| 5000. | mb2oohmoo=mbmooh2*o+oh | 7.28E+09 | 0.0 | 20190.7 |
| 5001. | mb3ooh2oo=mb2ooh3*o+oh | 5.44E+11 | 0.0 | 27915.0 |
| 5002. | mb3ooh4oo=mb4ooh2d+ho2 | 2.00E+11 | 0.0 | 20351.0 |
| 5003. | mb3ooh4oo=mb4ooh3*o+oh | 5.44E+11 | 0.0 | 26151.0 |
| 5004. | mb4ooh2oo=mb4ooh2d+ho2 | 1.09E+12 | 0.0 | 29206.5 |
| 5005. | mb4ooh2oo=mb2ooh4*o+oh | 4.06E+10 | 0.0 | 21863.0 |
| 5006. | mb4ooh3oo=mb4ooh2d+ho2 | 2.84E+12 | 0.0 | 26151.0 |
| 5007. | mb4ooh3oo=mb3ooh4*o+oh | 5.78E+11 | 0.0 | 27663.0 |
| 5008. | mbmooh2oo=mbmooh2d+ho2 | 1.09E+12 | 0.0 | 31846.2 |
| 5009. | mbmooh2oo=mb2oohm*o+oh | 2.11E+09 | 0.0 | 21703.0 |
| 5010. | mb2ooh3oo=>mb3ooh2oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 5011. | mb3ooh4oo=>mb4ooh3oo | 7.28E+09 | 0.0 | 12700.0 |
| 5012. | mb4ooh2*o=>ch2o+mp3j2*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 5013. | mb4ooh2d=>ch2o+mp2d3j+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 5014. | mb4ooh3*o=>ch2o+mp3j*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 5015. | mbmooh2*o=>ch2o+baoj2*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 5016. | mbmooh2d=>ch2o+baoj2d+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 5017. | mb3ooh2*o=>mp3*o2*o+ch3+oh | 1.05E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 5018. | mb3ooh4*o=>me2j+chocho+oh | 1.05E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 5019. | mb2ooh3*o=>ch3co+me2*o+oh | 5.25E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 5020. | mb2ooh3*o=>ch3cocho+ch3oco+oh | 5.25E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 5021. | mb2ooh4*o=>me2*o+ch2hco+oh | 1.05E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 5022. | mb2oohm*o=>me2*om*o+c2h5+oh | 1.05E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| 5023. | mbcy2om+h=>co2+sc3h5och2+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 5024. | mbcy2om+oh=>co2+sc3h5och2+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.2 |
| 5025. | mbcy2om+ho2=>co2+sc3h5och2+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13261.0 |
| 5026. | mbcy2om+h=>ch2o+c2h5coco+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 5027. | mbcy2om+oh=>ch2o+c2h5coco+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.2 |
| 5028. | mbcy2om+ho2=>ch2o+c2h5coco+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13261.0 |
| 5029. | mbcy4o2+h=>mp2d+hco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 5030. | mbcy4o2+oh=>mp2d+hco+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.2 |
| 5031. | mbcy4o2+ho2=>mp2d+hco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14398.0 |
| 5032. | mbcy4o2+h=>c2h4+me2j*o+h2 | 2.40E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 5033. | mbcy4o2+oh=>c2h4+me2j*o+h2o | 1.20E+06 | 2.0 | -1192.2 |
| 5034. | mbcy4o2+ho2=>c2h4+me2j*o+h2o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 13261.0 |
| 5035. | mbcy3o2+h=>ch3chco+ch3oco+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 5036. | mbcy3o2+oh=>ch3chco+ch3oco+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.2 |
| 5037. | mbcy3o2+ho2=>ch3chco+ch3oco+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13261.0 |
| 5038. | mbcy4o3+h=>ch2o+mp2d3j+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2875.0 |
| 5039. | mbcy4o3+oh=>ch2o+mp2d3j+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.2 |
| 5040. | mbcy4o3+ho2=>ch2o+mp2d3j+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 14398.0 |
| 5041. | mbcy4o3+h=>ch2co+me2j+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 5042. | mbcy4o3+oh=>ch2co+me2j+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.2 |
| 5043. | mbcy4o3+ho2=>ch2co+me2j+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13261.0 |
| 5044. | mb4*o+h=mb4j*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5045. | mbm*o+h=mbmj*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5046. | mb4*o+oh=mb4j*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5047. | mbm*o+oh=mbmj*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5048. | mb4*o+o=mb4j*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5049. | mbm*o+o=mbmj*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5050. | mb4*o+ch3=mb4j*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5051. | mbm*o+ch3=mbmj*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5052. | mb4*o+ho2=mb4j*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5053. | mbm*o+ho2=mbmj*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5054. | mp3j+co=mb4j*o | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5055. | hco+mp3j=mb4*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5056. | nc3h7+chooco=mbm*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5057. | baoj+co=mbmj*o | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5058. | mb4*o2*o+h=mb4j*o2*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5059. | mb4*o2*o+oh=mb4j*o2*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5060. | mb4*o2*o+o=mb4j*o2*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5061. | mb4*o2*o+ho2=mb4j*o2*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5062. | mb4*o2*o+ch3=mb4j*o2*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5063. | mb4*o2*o+ch3o=mb4j*o2*o+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5064. | mb4*o2*o+ch3o2=mb4j*o2*o+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5065. | mb4j*o2*o=co+mp3j2*o | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5066. | mb4j3*o+o2=mb4oo3*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5067. | mb4oo3*o+ho2=mb4ooh3*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5068. | mb4ooh3*o=mb4o3*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5069. | mb4oo3*o+ch3o2=>mb4o2*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5070. | mb4j2*o+o2=>mb4oo2*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5071. | mb4oo2*o+ho2=>mb4ooh2*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5072. | mb4ooh2*o=>mb4o2*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5073. | mb4oo2*o+ch3o2=>mb4o2*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5074. | ch2o+mp3j2*o=mb4o2*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5075. | hco+mp3j2*o=mb4*o2*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5076. | c6h13coco=c6h13co+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5077. | co2+c6h13co=oaoj2*o | 1.00E+11 | 0.0 | 30850.0 |
| 5078. | c6h13hco+o=c6h13co+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5079. | c6h13hco+ch3o=c6h13co+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5080. | c6h13hco+ch3o2=c6h13co+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5081. | c6h13hco+oh=c6h12cho-1+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| 5082. | c6h13hco+oh=c6h12cho-2+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 5083. | c6h13hco+oh=c6h12cho-3+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 5084. | c6h13hco+oh=c6h12cho-4+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 5085. | c6h13hco+oh=c6h12cho-5+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 5086. | c6h13hco+oh=c6h12cho-6+h2o | 2.70E+09 | 1.0 | -149.0 |
| 5087. | c6h13hco+ho2=c6h12cho-1+h2o2 | 9.03E-01 | 3.6 | 7153.0 |
| 5088. | c6h13hco+ho2=c6h12cho-2+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| 5089. | c6h13hco+ho2=c6h12cho-3+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| 5090. | c6h13hco+ho2=c6h12cho-4+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| 5091. | c6h13hco+ho2=c6h12cho-5+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| 5092. | c6h13hco+ho2=c6h12cho-6+h2o2 | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| 5093. | c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-1+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| 5094. | c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-2+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5095. | c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-3+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5096. | c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-4+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5097. | c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-5+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5098. | c6h13hco+ch3o2=c6h12cho-6+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 11510.0 |
| 5099. | c6h13co=>Ac6h13+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5100. | c6h12cho-6=acrol+pc4h9 | 7.40E+11 | 0.0 | 21970.0 |
| 5101. | c6h12cho-5=c6h12-1+hco | 8.25E+12 | -0.2 | 21900.0 |
| 5102. | c6h12cho-5=nc3h7+ac3h5hco | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 5103. | c6h12cho-4=c5h10+ch2hco | 7.40E+11 | 0.0 | 21970.0 |
| 5104. | c6h12cho-4=c2h5+c4h6+ch2o | 1.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 5105. | c6h12cho-3=ch3+c4h6+ch3hco | 3.17E+14 | -0.4 | 29900.0 |
| 5106. | c6h12cho-3=c4h8+ch2ch2hco | 8.25E+12 | -0.2 | 21900.0 |
| 5107. | c6h12cho-2=c3h6+c3h6hco-1 | 7.40E+11 | 0.0 | 21970.0 |
| 5108. | c6h12cho-1=c2h4+c4h8cho-1 | 7.40E+11 | 0.0 | 21970.0 |
| 5109. | c7ald4oxo+o2=bucomeco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5110. | c7ald4oxo+oh=prcoetco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5111. | c7ald4oxo+h=prcoetco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5112. | c7ald4oxo+o=prcoetco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5113. | c7ald4oxo+ho2=prcoetco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5114. | c7ald4oxo+ch3o=prcoetco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5115. | c7ald4oxo+ch3o2=prcoetco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5116. | c7ald3oxo+o2=bucomeco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 5117. | c7ald3oxo+oh=bucomeco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5118. | c7ald3oxo+h=bucomeco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5119. | c7ald3oxo+o=bucomeco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5120. | c7ald3oxo+ho2=bucomeco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5121. | c7ald3oxo+ch3o=bucomeco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5122. | c7ald3oxo+ch3o2=bucomeco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5123. | bucomeco=>nc4h9coch2+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5124. | prcoetco=>nprcoetp+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5125. | prcomeco=>c3h7coch2+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5126. | c5h11cocho+o2=c5h11coco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5127. | c5h11cocho+oh=c5h11coco+h2o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5128. | c5h11cocho+h=c5h11coco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5129. | c5h11cocho+o=c5h11coco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5130. | c5h11cocho+ho2=c5h11coco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5131. | c5h11cocho+ch3=c5h11coco+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5132. | c5h11cocho+ch3o=c5h11coco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5133. | c5h11cocho+ch3o2=c5h11coco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5134. | c5h11coco=c5h11co+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5135. | co2+c5h11co=hpaoj2*o | 1.00E+11 | 0.0 | 30850.0 |
| 5136. | c7h15qA=c7h15ojA+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5137. | c7h15qjA+ch3o2=>c7h15ojA+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5138. | ch2o+Ac6h13=c7h15ojA | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5139. | c7h14co=Ac6h13+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5140. | c7h12co=Bc6h11-1+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5141. | c6h12co=Ac5h11+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5142. | c6h10co=Ec5h9-1+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5143. | c6ald5oxo+o2=prcomeco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5144. | c6ald5oxo+oh=prcomeco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5145. | c6ald5oxo+h=prcomeco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5146. | c6ald5oxo+o=prcomeco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5147. | c6ald5oxo+ho2=prcomeco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5148. | c6ald5oxo+ch3o=prcomeco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5149. | c6ald5oxo+ch3o2=prcomeco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5150. | c6ald4oxo+o2=etcoetco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5151. | c6ald4oxo+oh=etcoetco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5152. | c6ald4oxo+h=etcoetco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5153. | c6ald4oxo+o=etcoetco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5154. | c6ald4oxo+ho2=etcoetco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5155. | c6ald4oxo+ch3o=etcoetco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5156. | c6ald4oxo+ch3o2=etcoetco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5157. | c6ald3oxo+o2=prcomeco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5158. | c6ald3oxo+oh=prcomeco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5159. | c6ald3oxo+h=prcomeco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5160. | c6ald3oxo+o=prcomeco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5161. | c6ald3oxo+ho2=prcomeco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5162. | c6ald3oxo+ch3o=prcomeco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5163. | c6ald3oxo+ch3o2=prcomeco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5164. | etcoetco=c2h5coc2h4p+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5165. | etcomeco=>c2h5coch2+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5166. | c5h11hco+o=c5h11co+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5167. | c5h11hco+ch3o=c5h11co+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5168. | c5h11hco+ch3o2=c5h11co+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5169. | c5h11co=>Ac5h11+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5170. | c4h9cocho+o2=c4h9coco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5171. | c4h9cocho+oh=c4h9coco+h2o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5172. | c4h9cocho+h=c4h9coco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5173. | c4h9cocho+o=c4h9coco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5174. | c4h9cocho+ho2=c4h9coco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5175. | c4h9cocho+ch3=c4h9coco+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5176. | c4h9cocho+ch3o=c4h9coco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5177. | c4h9cocho+ch3o2=c4h9coco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5178. | c4h9coco=nc4h9co+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5179. | co2+nc4h9co=hxaoj2*o | 1.00E+11 | 0.0 | 30850.0 |
| 5180. | ch2o+nc4h9co=nc4h9coch2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5181. | nc4h9coch2o2+ho2=nc4h9coch2o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5182. | nc4h9coch2o2h=nc4h9coch2o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5183. | nc4h9coch2o2+ch3o2=>nc4h9coch2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5184. | ic3h7+c6h12-1=c3h8+Cc6h11-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 5185. | nprcoetp+o2=c6h11oCqjA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5186. | c6h11oCqjA+ho2=c6h11oCqA+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5187. | c6h11oCqA=c6h11oCojA+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5188. | c6h11oCqjA+ch3o2=>c6h11oCojA+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5189. | ch2o+c3h7coch2=c6h11oCojA | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5190. | iprchcoch3+oh=aprchcoch3+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.34E+10 | 1.0 | 41430.0 |
| 5191. | iprchcoch3+oh=iprchcoch2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.12E+07 | -0.5 | 28070.0 |
| 5192. | iprchcoch3+oh=ic3h7cho+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.84E+06 | 1.0 | 15550.0 |
| 5193. | iprchcoch3+ho2=aprchcoch3+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+07 | 1.7 | 16690.0 |
| 5194. | iprchcoch3+ho2=iprchcoch2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.69E+01 | 1.8 | 10110.0 |
| 5195. | iprchcoch3+ch3o2=aprchcoch3+ch3o2h | 5.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+14 | -1.0 | 12390.0 |
| 5196. | iprchcoch3+ch3o2=iprchcoch2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.81E+09 | -1.0 | 12270.0 |
| 5197. | aprchcoch3+ho2=ic3h5cho+ch3co+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5198. | iprcoet+oh=iprdcoet+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.12E+07 | 1.5 | 28210.0 |
| 5199. | iprcoet+oh=tprdcoet+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.48E+13 | -0.2 | 29920.0 |
| 5200. | iprcoet+oh=iprcoetp+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.04E+11 | 0.0 | 20630.0 |
| 5201. | iprcoet+oh=iprcoets+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+09 | 1.4 | 28840.0 |
| 5202. | iprcoet+ho2=iprdcoet+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.32E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 5203. | iprcoet+ho2=tprdcoet+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.99E+12 | -0.5 | 11160.0 |
| 5204. | iprcoet+ho2=iprcoetp+h2o2 | 1.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.67E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 5205. | iprcoet+ho2=iprcoets+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+06 | 2.0 | 11320.0 |
| 5206. | iprcoet+ch3o2=iprdcoet+ch3o2h | 2.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 9.94E+04 | 2.0 | 2752.0 |
| 5207. | iprcoet+ch3o2=tprdcoet+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 8032.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+06 | 1.9 | 6554.0 |
| 5208. | iprcoet+ch3o2=iprcoetp+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+13 | -0.5 | 6627.0 |
| 5209. | iprcoet+ch3o2=iprcoets+ch3o2h | 1.77E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 9.83E+14 | -0.8 | 13740.0 |
| 5210. | iprdcoet=c3h6+c2h5co | 7.39E+18 | -1.6 | 25680.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 5211. | tprdcoet=ic3h5coet+h | 4.68E+17 | -0.8 | 43890.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.10E+13 | 0.0 | 1500.0 |
| 5212. | iprcoetp=ic3h7co+c2h4 | 1.19E+18 | -1.5 | 26110.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5213. | iprcoets=ch3chco+ic3h7 | 8.31E+16 | -0.7 | 40410.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5214. | iprcoc2h3+oh=iprdcoc2h3+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.04E+07 | 1.5 | 28210.0 |
| 5215. iprcoc2h3+oh=tprdcoc2h3+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+10 | 0.5 | 23210.0 |
| 5216. iprcoc2h3+oh=ch3hco+ic3h7co | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.01E+03 | 2.8 | 28410.0 |
| 5217. iprcoc2h3+ho2=iprdcoc2h3+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.23E+04 | 2.2 | 3467.0 |
| 5218. iprcoc2h3+ho2=tprdcoc2h3+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.03E+09 | 0.2 | 4451.0 |
| 5219. iprcoc2h3+ho2=ch2hco+ic3h7co+oh | 6.03E+09 | 0.0 | 7949.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5220. iprcoc2h3+ch3o2=iprdcoc2h3+ch3o2h | 2.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.69E+04 | 2.0 | 2747.0 |
| 5221. iprcoc2h3+ch3o2=tprdcoc2h3+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 8032.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.61E+02 | 2.5 | -156.8 |
| 5222. iprcoc2h3+ch3o2=ch2hco+ic3h7co+ch3o | 3.97E+11 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5223. iprdcoc2h3=c3h6+c2h3co | 4.29E+17 | -1.3 | 25540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 5224. tprdcoc2h3=ic3h6co+c2h3 | 1.46E+13 | -0.1 | 47250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 11600.0 |
| 5225. ic3h5coet+oh=ac3h4coet+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.53E+08 | 1.4 | 32400.0 |
| 5226. ic3h5coet+oh=ic3h5coetp+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.03E+11 | 0.0 | 20620.0 |
| 5227. ic3h5coet+oh=ic3h5coets+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.21E+08 | 1.4 | 28810.0 |
| 5228. ic3h5coet+oh=aceton+c2h5co | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.04E+10 | 0.1 | 26550.0 |
| 5229. ic3h5coet+ho2=ac3h4coet+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.48E+06 | 1.7 | 15140.0 |
| 5230. ic3h5coet+ho2=ic3h5coetp+h2o2 | 1.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.65E+04 | 2.2 | 3467.0 |
| 5231. ic3h5coet+ho2=ic3h5coets+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.54E+06 | 2.1 | 11290.0 |
| 5232. ic3h5coet+ch3o2=ac3h4coet+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.50E+15 | -1.1 | 17560.0 |
| 5233. ic3h5coet+ch3o2=ic3h5coetp+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.97E+13 | -0.5 | 6622.0 |
| 5234. ic3h5coet+ch3o2=ic3h5coets+ch3o2h | 1.77E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.59E+14 | -0.7 | 1370.0 |
| 5235. ac3h4coet=ac3h4+c2h5co | 8.69E+23 | -2.9 | 57300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 9600.0 |
| 5236. ic3h5coetp=c2h4+ic3h5co | 7.43E+16 | -1.2 | 23710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5237. ic3h5coets=ch3chco+tc3h5 | 1.42E+21 | -1.9 | 55640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5238. nprcoet+oh=prcoet-1+h2o | 2.06E+07 | 1.7 | 753.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.17E+06 | 1.7 | 20220.0 |
| 5239. nprcoet+oh=prcoet-2+h2o | 3.62E+07 | 1.6 | -247.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.23E+05 | 1.9 | 21760.0 |
| 5240. nprcoet+oh=prcoet-3+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.31E+13 | -0.3 | 28740.0 |
| 5241. nprcoet+oh=nprcoetp+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.28E+11 | 0.0 | 20660.0 |
| 5242. nprcoet+oh=nprcoets+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.31E+13 | -0.3 | 28740.0 |
| 5243. nprcoet+ho2=prcoet-1+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.54E+04 | 2.2 | 4492.0 |
| 5244. nprcoet+ho2=prcoet-2+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.65E+11 | -0.1 | 8242.0 |
| 5245. nprcoet+ho2=prcoet-3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.65E+13 | -0.7 | 6200.0 |
| 5246. nprcoet+ho2=nprcoetp+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.54E+04 | 2.2 | 2692.0 |
| 5247. nprcoet+ho2=nprcoets+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.65E+13 | -0.7 | 6200.0 |
| 5248. nprcoet+ch3o2=prcoet-1+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.84E+13 | -0.5 | 6657.0 |
| 5249. nprcoet+ch3o2=prcoet-2+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.71E+11 | -0.2 | 6874.0 |
| 5250. nprcoet+ch3o2=prcoet-3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.91E+15 | -0.8 | 12030.0 |
| 5251. nprcoet+ch3o2=nprcoetp+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.84E+13 | -0.5 | 4862.0 |
| 5252. nprcoet+ch3o2=nprcoets+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.91E+15 | -0.8 | 12030.0 |
| 5253. prcoet-1=c2h4+c2h5coch2 | 2.22E+15 | -0.8 | 23590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5254. prcoet-2=c3h6+c2h5co | 4.05E+16 | -1.1 | 26150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 5255. prcoet-3=c2h5coc2h3+ch3 | 2.92E+15 | -0.7 | 32300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5256. nprcoetp=nc3h7co+c2h4 | 5.40E+17 | -1.4 | 26040.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5257. nprcoets=ch3chco+nc3h7 | 1.97E+19 | -1.5 | 42860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5258. c5h10co=pc4h9+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5259. c5h8co=Dc4h7-1+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5260. c5ald4oxo+o2=mecoetco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5261. c5ald4oxo+oh=mecoetco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5262. c5ald4oxo+h=mecoetco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5263. c5ald4oxo+o=mecoetco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5264. c5ald4oxo+ho2=mecoetco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5265. c5ald4oxo+ch3o=mecoetco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5266. c5ald4oxo+ch3o2=mecoetco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5267. c5ald3oxo+o2=etcomeco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5268. c5ald3oxo+oh=etcomeco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5269. c5ald3oxo+h=etcomeco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5270. c5ald3oxo+o=etcomeco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5271. c5ald3oxo+ho2=etcomeco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5272. c5ald3oxo+ch3o=etcomeco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5273. c5ald3oxo+ch3o2=etcomeco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5274. c5ald2oxo+o2=prcoco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5275. c5ald2oxo+oh=prcoco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5276. c5ald2oxo+h=prcoco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5277. c5ald2oxo+o=prcoco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5278. c5ald2oxo+ho2=prcoco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5279. c5ald2oxo+ch3o=prcoco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5280. c5ald2oxo+ch3o2=prcoco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5281. mecoetco=>ch3coc2h4p+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5282. prcoco=>nc3h7co+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5283. choc3h6cho+o2=choc3h6co+ho2 | 4.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5284. choc3h6cho+oh=choc3h6co+h2o | 5.40E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5285. choc3h6cho+h=choc3h6co+h2 | 8.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5286. choc3h6cho+o=choc3h6co+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 1790.0 |
| 5287. choc3h6cho+ho2=choc3h6co+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5288. choc3h6cho+ch3o=choc3h6co+ch3oh | 2.30E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5289. choc3h6cho+ch3o2=choc3h6co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5290. choc3h6co=>c3h6hco-1+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5291. nc4h9hco+o2=nc4h9co+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5292. nc4h9hco+o=nc4h9co+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 5293. | nc4h9hco+ch3o=nc4h9co+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5294. | nc4h9hco+ch3o2=nc4h9co+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5295. | nc4h9hco+oh=c4h8cho-1+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| 5296. | nc4h9hco+oh=c4h8hco-2+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 5297. | nc4h9hco+oh=c4h8cho-3+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 5298. | nc4h9hco+oh=c4h8cho-4+h2o | 2.70E+09 | 1.0 | -149.0 |
| 5299. | nc4h9hco+ho2=c4h8cho-1+h2o2 | 9.03E-01 | 3.6 | 7153.0 |
| 5300. | nc4h9hco+ho2=c4h8hco-2+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| 5301. | nc4h9hco+ho2=c4h8cho-3+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| 5302. | nc4h9hco+ho2=c4h8cho-4+h2o2 | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| 5303. | nc4h9hco+ch3o2=c4h8cho-1+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| 5304. | nc4h9hco+ch3o2=c4h8hco-2+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5305. | nc4h9hco+ch3o2=c4h8cho-3+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5306. | nc4h9hco+ch3o2=c4h8cho-4+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 11510.0 |
| 5307. | nc4h9co=pc4h9+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5308. | c4h8cho-4=acrol+c2h5 | 7.40E+11 | 0.0 | 21970.0 |
| 5309. | c4h8cho-3=ch3+ac3h5hco | 3.17E+14 | -0.4 | 29900.0 |
| 5310. | c4h8cho-3=c4h8+hco | 8.25E+12 | -0.2 | 21900.0 |
| 5311. | c4h8cho-1=c2h4+ch2ch2hco | 7.40E+11 | 0.0 | 21970.0 |
| 5312. | c3h7coco=nc3h7co+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5313. | c4h8co=nc3h7+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5314. | c4h6co=sc3h5+hcco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5315. | c5h11qjA+ho2=c5h11qA+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5316. | c5h11qA=c5h11ojA+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5317. | ch2o+pc4h9=c5h11ojA | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5318. | ho2prcoch3=ch3coc3h6o-1+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5319. | ch3coc3h6o2-1+ch3o2=>ch3coc3h6o-1+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5320. | c2h5coc2h4o2+ch3o2=>c2h5coc2h4o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5321. | c5h12=pc4h9+ch3 | 5.00E+16 | 0.0 | 84660.0 |
| 5322. | c5h7o2=ch2chchco+ch3o | 2.50E+13 | 0.0 | 45000.0 |
| 5323. | Ac5h11+oh=c5h10+h2o | 2.43E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5324. | Ac5h11+h=c5h10+h2 | 1.25E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5325. | Bc5h11+ho2=c2c5h10+h2o2 | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5326. | Bc5h11+ho2=t2c5h10+h2o2 | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5327. | Bc5h11+oh=c5h10+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5328. | Bc5h11+oh=c2c5h10+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5329. | Bc5h11+oh=t2c5h10+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5330. | Bc5h11+h=c2c5h10+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5331. | Bc5h11+h=t2c5h10+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5332. | c5h10=c2h3+nc3h7 | 1.38E+16 | 0.0 | 93720.0 |
| 5333. | c5h10+o2=Cc5h9-1+ho2 | 2.70E+13 | 0.0 | 37000.0 |
| 5334. | c5h10+oh=ch2o+pc4h9 | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 5335. | c2c5h10=t2c5h10 | 1.86E+14 | 0.0 | 63501.0 |
| 5336. | c2c5h10=Cc4h7-1+ch3 | 1.00E+16 | 0.0 | 81000.0 |
| 5337. | c2c5h10+o2=Cc5h9-1+ho2 | 6.00E+13 | 0.0 | 40000.0 |
| 5338. | c2c5h10+o2=Dc5h9-2+ho2 | 2.70E+13 | 0.0 | 37000.0 |
| 5339. | c2c5h10+ho2=Cc5h9-1+h2o2 | 1.47E+11 | 0.0 | 14962.0 |
| 5340. | c2c5h10+ho2=Dc5h9-2+h2o2 | 9.80E+10 | 0.0 | 12583.0 |
| 5341. | c2c5h10+ho2=>ch3hco+c3h6+oh | 5.01E+11 | 0.0 | 12068.0 |
| 5342. | c2c5h10+oh=Cc5h9-1+h2o | 3.38E+13 | 0.0 | 3060.0 |
| 5343. | c2c5h10+oh=Dc5h9-2+h2o | 2.25E+13 | 0.0 | 2217.0 |
| 5344. | c2c5h10+o=Cc5h9-1+oh | 1.44E+13 | 0.0 | 2968.0 |
| 5345. | c2c5h10+o=Dc5h9-2+oh | 9.62E+12 | 0.0 | 1968.0 |
| 5346. | c2c5h10+o=ch3hco+c3h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5347. | c2c5h10+h=Cc5h9-1+h2 | 2.92E+13 | 0.0 | 5445.0 |
| 5348. | c2c5h10+h=Dc5h9-2+h2 | 1.95E+13 | 0.0 | 4445.0 |
| 5349. | c2c5h10+ch3=Cc5h9-1+ch4 | 1.50E+11 | 0.0 | 9800.0 |
| 5350. | c2c5h10+ch3=Dc5h9-2+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 8200.0 |
| 5351. | c2c5h10+c2h5=Cc5h9-1+c2h6 | 1.50E+11 | 0.0 | 9000.0 |
| 5352. | c2c5h10+c2h5=Dc5h9-2+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 8000.0 |
| 5353. | t2c5h10=Cc4h7-1+ch3 | 1.00E+16 | 0.0 | 81000.0 |
| 5354. | t2c5h10+o2=Cc5h9-1+ho2 | 2.70E+13 | 0.0 | 37000.0 |
| 5355. | t2c5h10+o2=Dc5h9-2+ho2 | 2.70E+13 | 0.0 | 37000.0 |
| 5356. | t2c5h10+ho2=Cc5h9-1+h2o2 | 1.47E+11 | 0.0 | 14962.0 |
| 5357. | t2c5h10+ho2=Dc5h9-2+h2o2 | 9.80E+10 | 0.0 | 12583.0 |
| 5358. | t2c5h10+ho2=>ch3hco+c3h6+oh | 5.01E+11 | 0.0 | 12068.0 |
| 5359. | t2c5h10+oh=Cc5h9-1+h2o | 3.38E+13 | 0.0 | 3060.0 |
| 5360. | t2c5h10+oh=Dc5h9-2+h2o | 2.25E+13 | 0.0 | 2217.0 |
| 5361. | t2c5h10+o=Cc5h9-1+oh | 1.44E+13 | 0.0 | 2968.0 |
| 5362. | t2c5h10+o=Dc5h9-2+oh | 9.62E+12 | 0.0 | 1968.0 |
| 5363. | t2c5h10+o=ch3hco+c3h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5364. | t2c5h10+h=Cc5h9-1+h2 | 2.92E+13 | 0.0 | 5445.0 |
| 5365. | t2c5h10+h=Dc5h9-2+h2 | 1.95E+13 | 0.0 | 4445.0 |
| 5366. | t2c5h10+ch3=Cc5h9-1+ch4 | 1.50E+11 | 0.0 | 8200.0 |
| 5367. | t2c5h10+ch3=Dc5h9-2+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 5368. | t2c5h10+c2h5=Cc5h9-1+c2h6 | 1.50E+11 | 0.0 | 9000.0 |
| 5369. | t2c5h10+c2h5=Dc5h9-2+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 8000.0 |
| 5370. | Cc5h9-1+Cc4h7-1=c5h8-13+c4h8 | 3.16E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5371. | Dc5h9-2+o2=>ch3co+tc3h5+oh | 3.97E+12 | 0.0 | -250.0 |
| 5372. | ic3h7coch3+oh=ic3h6coch3+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 4.78E+07 | 1.5 | 28270.0 |
| 5373. | ic3h7coch3+oh=tc3h6coch3+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.42E+13 | -0.2 | 29920.0 |
| 5374. | ic3h7coch3+oh=ic3h7coch2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.22E+13 | -0.7 | 27700.0 |
| 5375. | ic3h7coch3+ho2=ic3h6coch3+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 5.09E+04 | 2.2 | 3532.0 |
| 5376. | ic3h7coch3+ho2=tc3h6coch3+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.82E+12 | -0.5 | 11160.0 |
| 5377. | ic3h7coch3+ho2=ic3h7coch2+h2o2 | 1.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.32E+07 | 1.5 | 10540.0 |
| 5378. | ic3h7coch3+ch3o2=ic3h6coch3+ch3o2h | 2.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.53E+05 | 2.0 | 2812.0 |
| 5379. | ic3h7coch3+ch3o2=tc3h6coch3+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 8032.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.26E+06 | 1.9 | 6554.0 |
| 5380. | ic3h7coch3+ch3o2=ic3h7coch2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+16 | -1.2 | 11900.0 |
| 5381. | tc3h6coch3+o2=aceton+ch2co+oh | 3.62E+10 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5382. | tc3h6coch3+o2=ic3h5coch3+ho2 | 2.72E+11 | 0.0 | 7240.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.63E+09 | 0.2 | 14820.0 |
| 5383. | tc3h6coch3=ic3h5coch3+h | 1.83E+17 | -0.8 | 43940.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+13 | 0.0 | 1560.0 |
| 5384. | tc3h6coch3=ic3h6co+ch3 | 2.44E+15 | -0.4 | 41500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5385. | ic3h7coch2=ic3h7+ch2co | 2.88E+15 | -0.5 | 39940.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 5386. | ic3h6coch3=c3h6+ch3co | 5.49E+18 | -1.6 | 27960.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 5387. | ic3h5coch3=ic3h5co+ch3 | 5.69E+17 | -0.5 | 80100.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5388. | ic3h5coch3=tc3h5+ch3co | 6.07E+24 | -2.2 | 96960.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5389. | ic3h5coch3+oh=ic3h5coch2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.44E+13 | -0.7 | 27660.0 |
| 5390. | ic3h5coch3+o=ic3h5coch2+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 5962.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.40E+13 | -0.7 | 15180.0 |
| 5391. | ic3h5coch3+h=ic3h5coch2+h2 | 9.30E+12 | 0.0 | 6357.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.71E+14 | -0.7 | 17670.0 |
| 5392. | ic3h5coch3+ch3=ic3h5coch2+ch4 | 1.62E+11 | 0.0 | 9630.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+14 | -0.7 | 21420.0 |
| 5393. | ic3h5coch3+ho2=ic3h5coch2+h2o2 | 8.50E+12 | 0.0 | 20460.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8000.0 |
| 5394. ic3h5coch3+o2=ic3h5coch2+ho2 | 6.00E+13 | 0.0 | 46000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 2000.0 |
| 5395. ic3h5coch2=tc3h5+ch2co | 1.00E+14 | 0.0 | 31000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 5396. ic3h5coch3+oh=ac3h4coch3+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.68E+08 | 1.4 | 32460.0 |
| 5397. ic3h5coch3+o=ac3h4coch3+oh | 6.03E+10 | 0.7 | 7633.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.25E+11 | 0.1 | 23140.0 |
| 5398. ic3h5coch3+h=ac3h4coch3+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.43E+06 | 1.9 | 20090.0 |
| 5399. ic3h5coch3+ch3=ac3h4coch3+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+03 | 2.9 | 23760.0 |
| 5400. ic3h5coch3+ho2=ac3h4coch3+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.91E+06 | 1.7 | 15200.0 |
| 5401. ic3h5coch3+o2=ac3h4coch3+ho2 | 6.03E+13 | 0.0 | 47590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.17E+13 | -0.3 | 7712.0 |
| 5402. ic3h5coch3+oh=sc3h5coch2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+13 | -0.6 | 28590.0 |
| 5403. ic3h5coch3+ho2=sc3h5coch2+h2o2 | 8.50E+12 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.73E+15 | -0.9 | 16390.0 |
| 5404. ic3h5coch3+ch3o2=ac3h4coch3+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.09E+16 | -1.3 | 19070.0 |
| 5405. ic3h5coch3+ch3o2=sc3h5coch2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.52E+15 | -1.1 | 14590.0 |
| 5406. sc3h5coch2=ch2co+sc3h5 | 1.78E+19 | -1.6 | 59400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5407. ac3h4coch3=ac3h4+ch3co | 1.40E+13 | 0.0 | 60000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.68E+00 | 2.9 | 12300.0 |
| 5408. c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-1+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.28E+13 | -0.5 | 6607.0 |
| 5409. c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-2+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.93E+11 | -0.1 | 6774.0 |
| 5410. c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.37E+15 | -0.8 | 11990.0 |
| 5411. c3h7coch3+ch3o2=c3h7coch2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.34E+16 | -1.2 | 11930.0 |
| 5412. c2h5coc2h5+c2h3=c2h5coc2h4p+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.85E+08 | 0.8 | 14040.0 |
| 5413. c2h5coc2h5+c2h3=c2h5coc2h4s+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 5600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.98E+10 | 0.5 | 18760.0 |
| 5414. c2h5coc2h5+c2h5=c2h5coc2h4p+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+13 | -0.6 | 14000.0 |
| 5415. c2h5coc2h5+c2h5=c2h5coc2h4s+c2h6 | 6.00E+10 | 0.0 | 8600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.10E+15 | -0.9 | 18720.0 |
| 5416. c2h5coc2h5+ch3o=c2h5coc2h4p+ch3oh | 4.34E+11 | 0.0 | 6460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.48E+09 | 0.0 | 9020.0 |
| 5417. c2h5coc2h5+ch3o=c2h5coc2h4s+ch3oh | 2.90E+11 | 0.0 | 2771.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.30E+11 | -0.3 | 14850.0 |
| 5418. c2h5coc2h5+ch3o2=c2h5coc2h4p+ch3o2h | 6.02E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E+13 | -0.5 | 6642.0 |
| 5419. c2h5coc2h5+ch3o2=c2h5coc2h4s+ch3o2h | 4.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+15 | -0.8 | 12030.0 |
| 5420. c4ald3oxo+o2=mecomeco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5421. c4ald3oxo+oh=mecomeco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5422. c4ald3oxo+h=mecomeco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5423. c4ald3oxo+o=mecomeco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5424. c4ald3oxo+ho2=mecomeco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5425. c4ald3oxo+ch3o=mecomeco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5426. c4ald3oxo+ch3o2=mecomeco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5427. c4ald2oxo+o2=c2h5coco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5428. c4ald2oxo+oh=c2h5coco+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5429. c4ald2oxo+h=c2h5coco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5430. c4ald2oxo+o=c2h5coco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5431. c4ald2oxo+ho2=c2h5coco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5432. c4ald2oxo+ch3o=c2h5coco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5433. c4ald2oxo+ch3o2=c2h5coco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5434. mecomeco=>ch2coch3+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5435. choc2h4cho+o2=choc2h4co+ho2 | 4.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 5436. choc2h4cho+oh=choc2h4co+h2o | 5.40E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5437. choc2h4cho+h=choc2h4co+h2 | 8.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5438. choc2h4cho+o=choc2h4co+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 1790.0 |
| 5439. choc2h4cho+ho2=choc2h4co+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5440. choc2h4cho+ch3o=choc2h4co+ch3oh | 2.30E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5441. choc2h4cho+ch3o2=choc2h4co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5442. choc2h4co=>ch2ch2hco+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 5443. ch3coc2h4p+o2=c4h7oBqjD | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5444. ch2o+ch2coch3=c4h7oBojD | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5445. c4h7oBqjD+ho2=c4h7oBqD+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5446. c4h7oBqD=c4h7oBojD+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5447. c4h7oBqjD+ch3o2=>c4h7oBojD+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5448. c2h5coch2o2+ch3o2=>c2h5coch2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5449. ch3coc3h6o2-1+ho2=ho2prcoch3+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5450. ch2chchco+h=cjhchchco+h2 | 4.21E-03 | 4.6 | 2583.0 |
| 5451. ch2chchco+oh=cjhchchco+h2o | 1.01E+13 | 0.0 | 5955.0 |
| 5452. ch2chchco+ch3=cjhchchco+ch4 | 3.31E+00 | 3.7 | 9500.0 |
| 5453. ch2chchco+o=cjhchchco+oh | 1.20E+11 | 0.7 | 8959.0 |
| 5454. ch2chchco+ho2=cjhchchco+h2o2 | 8.50E+13 | 0.0 | 30430.0 |
| 5455. c2h2+hcco=cjhchchco | 1.61E+40 | -8.6 | 20331.0 |
| 5456. c2h3+hcco=ch2chchco | 8.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5457. ch2chchco+h=co+ac3h5 | 1.10E+13 | 0.0 | 3400.0 |
| 5458. ch2chchco+h=c2h4+hcco | 1.10E+13 | 0.0 | 3400.0 |
| 5459. ch2chchco+oh=hcco+ch3hco | 3.73E+12 | 0.0 | -1013.0 |
| 5460. ch2chchco+oh=ch3chcho+co | 3.73E+12 | 0.0 | -1013.0 |
| 5461. mp2dmj+o2=mp2dmoo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5462. mp2dmoo+ho2=mp2dmooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5463. mp2dmooh=mp2dmo+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5464. mp2dmoo+ch3o2=>mp2dmo+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5465. ch2o+c2h3co2=mp2dmo | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5466. mp3j+o2=mp3oo | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5467. mp3oo+ho2=mp3ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5468. mp3ooh=mp3o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5469. mp3oo+ch3o2=>mp3o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5470. ch2o+me2j=mp3o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5471. mp3j2*o+o2=>mp3oo2*o | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5472. mp3oo2*o+ho2=>mp3ooh2*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5473. mp3ooh2*o=>mp3o2*o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5474. mp3oo2*o+ch3o2=>mp3o2*o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5475. ch2o+me2j*o=mp3o2*o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5476. mp3j+o2=mp2d+ho2 | 1.00E+12 | 0.0 | 5030.0 |
| 5477. mp2d+h=mp2d3j+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 5478. mp2d+oh=mp2d3j+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 5479. mp2d+ch3=mp2d3j+ch4 | 1.51E+00 | 3.5 | 5481.0 |
| 5480. mp2d+ho2=mp2d3j+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5481. mp2d+o=mp2d3j+oh | 5.52E+05 | 2.5 | 2830.0 |
| 5482. mp2d+ch3o2=mp2d3j+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 5483. mp2d+h=mp2d2j+h2 | 6.02E+05 | 2.4 | 2583.0 |
| 5484. mp2d+oh=mp2d2j+h2o | 5.73E+10 | 0.5 | 63.0 |
| 5485. mp2d+ch3=mp2d2j+ch4 | 6.01E-10 | 6.4 | 893.0 |
| 5486. mp2d+ho2=mp2d2j+h2o2 | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| 5487. mp2d+o=mp2d2j+oh | 3.83E+05 | 2.4 | 1140.0 |
| 5488. mp2d+ch3o2=mp2d2j+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |

```
5489. mp2d+h=mp2dmj+h2                          1.96E+06    2.4     4471.0
5490. mp2d+oh=mp2dmj+h2o                        7.02E+07    1.6      -35.0
5491. mp2d+ch3=mp2dmj+ch4                       2.27E+00    3.5     5481.0
5492. mp2d+ho2=mp2dmj+h2o2                      1.45E+04    2.6    13910.0
5493. mp2d+o=mp2dmj+oh                          8.28E+05    2.5     2830.0
5494. mp2d+ch3o2=mp2dmj+ch3o2h                  1.45E+04    2.6    13910.0
5495. mp2d=c2h3co+ch3o                          2.98E+22   -1.9    90170.0
5496. mp2d=c2h3co2+ch3                          3.84E+22   -2.0    88030.0
5497. mp2d3j=c2h2+ch3oco                        7.68E+19   -1.5    47410.0
5498. mp2d2j=c2h2+ch3oco                        6.30E+24   -2.9    56150.0
5499. mp2dmj=c2h3co+ch2o                        5.75E+23   -2.8    23540.0
5500. mp2dmj=mp2d3j                             4.35E+13   -1.4    12540.0
5501. mp2dmj=mp2d2j                             4.99E+09   -0.2    17160.0
5502. mp2d2j=mp2d3j                             3.12E+13    0.2    42140.0
5503. mp2d+o=ch3oco+ch2hco                      5.01E+07    1.8       76.0
5504. mp3*o+oh=mp3j*o+h2o                       2.69E+10    0.8     -340.0
5505. mp3*o2*o+oh=mp3j*o2*o+h2o                 2.69E+10    0.8     -340.0
5506. me2j*o+co=mp3j*o2*o                       1.50E+11    0.0     3000.0
5507. mp3*o+h=mp3j*o+h2                         4.00E+13    0.0     4200.0
5508. mp3*o2*o+h=mp3j*o2*o+h2                   4.00E+13    0.0     4200.0
5509. mp2d+h=mp3j                               1.00E+13    0.0     2900.0
5510. mp3*o+o=mp3j*o+oh                         5.00E+12    0.0     1790.0
5511. mp3*o2*o+o=mp3j*o2*o+oh                   5.00E+12    0.0     1790.0
5512. mp3*o+ho2=mp3j*o+h2o2                     2.80E+12    0.0    13600.0
5513. mp3*o2*o+ho2=mp3j*o2*o+h2o2               2.80E+12    0.0    13600.0
5514. mp3*o+ch3=mp3j*o+ch4                      1.70E+12    0.0     8440.0
5515. mp3*o2*o+ch3=mp3j*o2*o+ch4                1.70E+12    0.0     8440.0
5516. co+me2j=mp3j*o                            1.50E+11    0.0     3000.0
5517. ch2co+ch3oco=mp3j*o                       1.00E+11    0.0     7600.0
5518. ch2co+ch3oco=mp3j2*o                      1.00E+11    0.0     9200.0
5519. c2h3+ch3oco=mp2d                          1.00E+13    0.0        0.0
5520. ch2hco+ch3oco=mp3*o                       1.00E+13    0.0        0.0
5521. hco+me2j*o=mp3*o2*o                       1.00E+13    0.0        0.0
5522. co2+c2h5co=baoj2*o                        1.00E+11    0.0    30850.0
5523. co2+sc3h5=baoj2d                          1.00E+11    0.0     9200.0
5524. meall+oh=ch3ccch2+h2o                     1.00E+07    2.0     2000.0
5525. meall+oh=ch3chcch+h2o                     2.00E+07    2.0     2500.0
5526. meall+h=ch3ccch2+h2                       1.50E+07    2.0     6000.0
5527. meall+h=ch3chcch+h2                       3.00E+07    2.0     6500.0
5528. ch3chcch+h=ch3+c3h3                       1.00E+14    0.0        0.0
5529. ch3chcch+oh=c4h4+h2o                      3.00E+13    0.0        0.0
5530. ic4h5+h=ch3ccch2+h                        3.00E+13    0.0        0.0
5531. ch3ccch2+h=ch3+c3h3                       1.00E+14    0.0        0.0
5532. ch3ccch2+o2=ch3co+ch2co                   4.16E+10    0.0     2510.0
5533. ch3ccch2+h=h2cccch2+h2                    1.00E+14    0.0     8000.0
5534. ch3ccch2+oh=h2cccch2+h2o                  1.00E+13    0.0        0.0
5535. ch3chcch(+m)=c4h4+h(+m)                   1.00E+13    0.0    49000.0
    Low pressure limit:  0.20000E+15  0.00000E+00  0.41000E+05
5536. ch3ccch2(+m)=h2cccch2+h(+m)               1.00E+13    0.0    56000.0
    Low pressure limit:  0.20000E+15  0.00000E+00  0.48000E+05
5537. h2cccch2+oh=ic4h3+h2o                     2.00E+07    2.0     2000.0
5538. h2cccch2+h=ic4h3+h2                       3.00E+07    2.0     6000.0
5539. butyne+oh=ch3chcch+h2o                    1.00E+07    2.0     2000.0
5540. ch2o+sc3h5=sc3h5och2                      7.50E+10    0.0    36730.0
5541. co+c2h5co=c2h5coco                        1.50E+11    0.0     3000.0
5542. ch3+c2h3co=c2h5chco                       1.00E+13    0.0        0.0
5543. butanone+oh=ch3coc2h4p+h2o                7.55E+09    1.0     1586.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.53E+09    1.0    21020.0
5544. butanone+oh=ch3coc2h4s+h2o                8.45E+11    0.0     -228.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.59E+13   -0.2    28620.0
5545. butanone+ho2=ch3coc2h4p+h2o2              2.38E+04    2.5    16490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.86E+04    2.2     4459.0
5546. butanone+ho2=ch3coc2h4s+h2o2              2.00E+11    0.0     8698.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.23E+13   -0.6     6080.0
5547. butanone+o=ch3coc2h4p+oh                  2.25E+13    0.0     7700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.62E+11    0.0     9882.0
5548. butanone+o=ch3coc2h4s+oh                  3.07E+13    0.0     3400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.85E+13   -0.2    15000.0
5549. butanone+o=c2h5coch2+oh                   5.00E+12    0.0     5962.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          6.59E+13   -0.7    15190.0
5550. butanone+h=ch3coc2h4p+h2                  9.16E+06    2.0     7700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.28E+05    2.0    11980.0
5551. butanone+h=ch3coc2h4s+h2                  4.46E+06    2.0     3200.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.93E+07    1.8    16890.0
5552. butanone+o2=ch3coc2h4p+ho2                2.05E+13    0.0    51310.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.74E+10    0.3    -1895.0
5553. butanone+o2=ch3coc2h4s+ho2                1.55E+13    0.0    41970.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.22E+12    0.1    -1822.0
5554. butanone+o2=c2h5coch2+ho2                 2.05E+13    0.0    49150.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.12E+13   -0.4     2988.0
5555. butanone+ch3=ch3coc2h4p+ch4               3.19E+01    3.2     7172.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.89E+01    3.2    11930.0
5556. butanone+ch3=ch3coc2h4s+ch4               1.74E+00    3.5     3680.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.97E+02    3.2    17850.0
5557. butanone+ch3o=ch3coc2h4p+ch3oh            2.17E+11    0.0     6460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.89E+09    0.0     9007.0
5558. butanone+ch3o=ch3coc2h4s+ch3oh            1.45E+11    0.0     2771.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.03E+11   -0.2    14730.0
5559. butanone+ch3o2=ch3coc2h4p+ch3o2h          3.01E+12    0.0    19380.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.52E+12   -0.5     4329.0
5560. butanone+ch3o2=ch3coc2h4s+ch3o2h          2.00E+12    0.0    15250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.64E+14   -0.7     9612.0
5561. butanone+c2h3=ch3coc2h4p+c2h4             5.00E+11    0.0    10400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.44E+08    0.8    14030.0
5562. butanone+c2h3=ch3coc2h4s+c2h4             3.00E+11    0.0     3400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.91E+10    0.6    16440.0
5563. butanone+c2h3=c2h5coch2+c2h4              6.15E+10    0.0     4278.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.72E+10    0.1    14950.0
5564. butanone+c2h5=ch3coc2h4p+c2h6             5.00E+10    0.0    13400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          9.55E+12   -0.6    13990.0
5565. butanone+c2h5=ch3coc2h4s+c2h6             3.00E+10    0.0     8600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.32E+14   -0.8    18600.0
5566. tc3h6cho+ho2=tc3h6ocho+oh                 9.64E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.02E+17   -1.2    21010.0
5567. tc3h6ocho=aceton+hco                      3.98E+13    0.0     9700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.17E+08    0.8    14240.0
5568. tc3h6cho=ic3h5cho+h                       2.88E+16   -0.6    41280.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.30E+13    0.0     1200.0
5569. tc3h6cho=ic3h6co+h                        8.88E+16   -0.7    44350.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.30E+13    0.0     4800.0
5570. tc3h6cho+h2=ic3h7cho+h                    2.16E+05    2.4    18990.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.32E+05    2.5     3550.0
5571. ic3h7cho=tc3h6cho+h                       2.30E+18   -0.9    92000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.00E+14    0.0        0.0
5572. tc3h6cho+ch2o=ic3h7cho+hco                2.52E+08    1.9    18190.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.23E+07    2.0    17420.0
5573. ic3h6co+oh=ic3h7+co2                      1.73E+12    0.0    -1010.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.58E+14   -0.4    55480.0
5574. tc3h6ohcho=tc3h6cho+oh                    9.99E+20   -1.5    87480.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+13    0.0        0.0
5575. tc3h6ohcho=tc3h6oh+hco                    5.16E+23   -1.9    76850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.81E+13    0.0        0.0
```

| | | | |
|---|---|---|---|
| 5576. tc3h6o2cho=tc3h6cho+o2 | 2.79E+25 | -4.1 | 28450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+17 | -2.1 | 0.0 |
| 5577. tc3h6o2cho=ipro2hcho | 6.00E+11 | 0.0 | 29880.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.39E+12 | -0.5 | 14800.0 |
| 5578. tc3h6o2cho=tc3h6o2hco | 1.00E+11 | 0.0 | 25750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.26E+11 | -0.5 | 22800.0 |
| 5579. ipro2hcho=ic3h5cho+ho2 | 8.94E+20 | -2.4 | 15030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.23E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5580. tc3h6o2hco=aceton+co+oh | 4.24E+18 | -1.4 | 4800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5581. ic3h6co+oh=tc3h6oh+co | 2.00E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.01E+09 | 0.9 | 31540.0 |
| 5582. ic3h7cho+ho2=ic3h7co+h2o2 | 3.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.71E+12 | -0.3 | 11990.0 |
| 5583. ic3h7cho+ho2=tc3h6cho+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.37E+12 | -0.4 | 11050.0 |
| 5584. ic3h7cho+ch3=ic3h7co+ch4 | 3.98E+12 | 0.0 | 8700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.32E+13 | -0.1 | 25630.0 |
| 5585. ic3h7cho+o=ic3h7co+oh | 7.18E+12 | 0.0 | 1389.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.05E+11 | -0.1 | 15740.0 |
| 5586. ic3h7cho+o2=ic3h7co+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.62E+11 | 0.3 | -3432.0 |
| 5587. ic3h7cho+oh=ic3h7co+h2o | 2.41E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.33E+12 | -0.1 | 30820.0 |
| 5588. ic3h7cho+oh=tc3h6cho+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E+13 | -0.1 | 29810.0 |
| 5589. ic3h7cho+h=ic3h7co+h2 | 2.60E+12 | 0.0 | 2600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5590. ic3h7cho=ic3h7+hco | 1.13E+17 | 0.0 | 79760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5591. ic3h7co=ic3h7+co | 1.43E+13 | 0.0 | 10950.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 5592. ic3h7cho+oh=ic3h6cho+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.39E+05 | 2.0 | 19130.0 |
| 5593. ic3h7cho+ho2=ic3h6cho+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.33E+04 | 2.2 | 3468.0 |
| 5594. ic3h7cho+ch3o2=ic3h6cho+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.38E+05 | 2.0 | 3742.0 |
| 5595. tc3h6cho+o2=ic3h5cho+ho2 | 2.72E-19 | 0.0 | 7240.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.39E+11 | -0.2 | 17310.0 |
| 5596. tc3h6cho+o2=aceton+co+oh | 3.62E-20 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5597. tc3h6cho+ho2=ic3h7cho+o2 | 3.68E+12 | 0.0 | 1310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+14 | -0.2 | 43350.0 |
| 5598. tc3h6cho+ch3=ic3h5cho+ch4 | 3.01E+12 | -0.3 | -131.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.21E+15 | -0.8 | 67900.0 |
| 5599. ic3h5cho+oh=ic3h5co+h2o | 1.07E+13 | 0.0 | -348.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5600. ic3h5cho+ho2=ic3h5co+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.76E+12 | -0.3 | 12000.0 |
| 5601. ic3h5cho+ch3=ic3h5co+ch4 | 3.98E+12 | 0.0 | 8700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.52E+13 | 0.0 | 25570.0 |
| 5602. ic3h5cho+o=ic3h5co+oh | 7.18E+12 | 0.0 | 1389.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.61E+11 | 0.0 | 15680.0 |
| 5603. ic3h5cho+o2=ic3h5co+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 40700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.31E+10 | 0.3 | -394.0 |
| 5604. ic3h5cho+h=ic3h5co+h2 | 2.60E+12 | 0.0 | 2600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.80E+11 | 0.0 | 18990.0 |
| 5605. ic3h5co=tc3h5+co | 4.78E+12 | 0.0 | 27470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+11 | 0.0 | 4809.0 |
| 5606. nc3h7hco+o2=nc3h7co+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+07 | 0.5 | 4000.0 |
| 5607. nc3h7hco+o=nc3h7co+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 19000.0 |
| 5608. nc3h7hco+ch3o=nc3h7co+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 5609. nc3h7hco+ch3o2=nc3h7co+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 10000.0 |
| 5610. nc3h7hco+oh=c3h6cho-2+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.06E+05 | 1.9 | 21940.0 |
| 5611. nc3h7hco+oh=c3h6cho-3+h2o | 2.70E+09 | 1.0 | -149.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.19E+10 | 0.8 | 28740.0 |
| 5612. nc3h7hco+ho2=c3h6cho-2+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+03 | 2.6 | 4424.0 |
| 5613. nc3h7hco+ho2=c3h6cho-3+h2o2 | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.92E+05 | 2.0 | 7954.0 |
| 5614. nc3h7hco+ch3o2=c3h6cho-2+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.05E+03 | 2.4 | 3704.0 |
| 5615. nc3h7hco+ch3o2=c3h6cho-3+ch3o2h | 9.63E+03 | 2.6 | 11510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.39E+06 | 1.8 | 8212.0 |
| 5616. nc3h7co=nc3h7+co | 5.32E+15 | -0.9 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4800.0 |
| 5617. c43oo2*o=ch3coc2h4s+o2 | 1.94E+20 | -2.2 | 26170.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 5618. c43oo2*o=c4j3ooh2*o | 8.90E+12 | 0.0 | 29700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.70E+13 | -0.5 | 16960.0 |
| 5619. c4j3ooh2*o=mvk+ho2 | 2.03E+19 | -2.4 | 14130.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.00E+10 | 0.0 | 7800.0 |
| 5620. ic3h6co+h=ic3h7+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5621. ic3h6co+o=aceton+co | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5622. sc3h5cho+ho2=sc3h5co+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+13 | -0.3 | 17890.0 |
| 5623. sc3h5cho+ch3=sc3h5co+ch4 | 3.98E+12 | 0.0 | 8700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.31E+13 | 0.0 | 31460.0 |
| 5624. sc3h5cho+o=sc3h5co+oh | 7.18E+12 | 0.0 | 1389.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.31E+12 | 0.0 | 21570.0 |
| 5625. sc3h5cho+o2=sc3h5co+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.01E+11 | 0.3 | 2394.0 |
| 5626. sc3h5cho+h=sc3h5co+h2 | 2.60E+12 | 0.0 | 2600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+12 | 0.0 | 24880.0 |
| 5627. sc3h5cho+oh=sc3h5co+h2o | 1.07E+13 | 0.0 | -348.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.92E+13 | 0.0 | 37080.0 |
| 5628. ch3coc2h4s=mvk+h | 3.42E+16 | -0.8 | 41770.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 5629. ch3coc2h4s=ch3chco+ch3 | 1.41E+15 | -0.4 | 38340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5630. c3h6cho-3=c2h5chco+h | 8.43E+15 | -0.6 | 40400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 5631. c3h6cho-3=acrol+ch3 | 3.17E+14 | -0.4 | 29900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5632. c3h6cho-2=sc3h5cho+h | 4.95E+12 | -0.1 | 31300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 2900.0 |
| 5633. c3h6cho-2=c3h6+hco | 8.25E+12 | -0.2 | 21900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 5634. ic3h6cho=c3h6+hco | 1.03E+15 | -0.6 | 23170.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5635. ic3h6cho=acrol+ch3 | 2.42E+13 | -0.3 | 22470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5636. ac3h5hco=ac3h5+hco | 1.81E+19 | -1.1 | 68480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 5637. ac3h5hco+ch3o2=ac3h5co+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+13 | -0.5 | 11270.0 |
| 5638. hcoch2hco+o=hcoch2co+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 1790.0 |
| 5639. hcoch2hco+ch3o=hcoch2co+ch3oh | 2.30E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 5640. hcoch2hco+ch3o2=hcoch2co+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 5641. ch2ch2hco+o2=>o2c2h4cho | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 5642. o2c2h4cho+ho2=>ho2c2h4cho+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5643. ho2c2h4cho=>oc2h4cho+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5644. o2c2h4cho+ch3o2=>oc2h4cho+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5645. ch2o+ch2hco=oc2h4cho | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5646. ch3coch2o2+ch3o2=>ch3coch2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5647. ch3co+hco=ch3cocho | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5648. me2j+o2=me2oo | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 5649. me2oo+ho2=me2ooh+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 5650. me2ooh=me2o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 5651. me2oo+ch3o2=>me2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 5652. ch2o+ch3oco=me2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5653. hco+ch3oco=me2*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5654. hco+chooco=me2*om*o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5655. me2*o+h=me2j*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5656. me2*om*o+h=me2j*om*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5657. me2*om*o+h=me2*omj*o+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5658. me2*o+oh=me2j*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5659. me2*om*o+oh=me2j*om*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5660. me2*om*o+oh=me2*omj*o+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| 5661. me2*o+o=me2j*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5662. me2*om*o+o=me2j*om*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5663. me2*om*o+o=me2*omj*o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5664. me2*o+ch3=me2j*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5665. me2*om*o+ch3=me2j*om*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5666. me2*om*o+ch3=me2*omj*o+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5667. me2*o+ho2=me2j*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5668. me2*om*o+ho2=me2j*om*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5669. me2*om*o+ho2=me2*omj*o+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 5670. chooco+co=me2j*om*o | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5671. choco+co2=me2*omj*o | 1.50E+11 | 0.0 | 36730.0 |
| 5672. ch3oco+co=me2j*o | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5673. c2h5chco+h=nc3h7co | 1.00E+13 | 0.0 | 2900.0 |
| 5674. ch2co+c2h5=nc3h7co | 1.00E+11 | 0.0 | 7600.0 |
| 5675. ch3cocho+o=ch3coco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 5676. ch3cocho+ch3=ch3coco+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 5677. aceton=ch3co+ch3 | 2.70E+16 | 0.0 | 81740.0 |
| 5678. aceton+o2=ch2coch3+ho2 | 1.00E+13 | 0.0 | 51000.0 |
| 5679. aceton+o=ch2coch3+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 5962.0 |
| 5680. aceton+ch3o=ch2coch3+ch3oh | 1.00E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 9000.0 |
| 5681. c2h2+ch3=ac3h4+h | 6.74E+19 | -2.1 | 31590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.15E+16 | -0.7 | 15790.0 |
| 5682. c3h2+o2=hcco+co+h | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5683. c2h5co=c2h5+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 5684. c2h5hco+o=c2h5co+oh | 5.01E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 19160.0 |
| 5685. c2h5hco+ch3o=c2h5co+ch3oh | 1.00E+12 | 0.0 | 3300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| 5686. c2h5hco=c2h5+hco | 9.85E+18 | -0.7 | 81710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5687. c2h5hco+nc3h7=c2h5co+c3h8 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+14 | 0.0 | 18790.0 |
| 5688. c2h5hco+ic3h7=c2h5co+c3h8 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+14 | 0.0 | 18790.0 |
| 5689. c2h5hco+c2h3=c2h5co+c2h4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.49E+14 | 0.0 | 26190.0 |
| 5690. c2h5hco+ac3h5=c2h5co+c3h6 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 28000.0 |
| 5691. c2h5hco+ch3o2=c2h5co+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 11930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.36E+13 | -0.5 | 8983.0 |
| 5692. c2h5hco+c2h5o=c2h5co+c2h5oh | 6.03E+11 | 0.0 | 3300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.02E+11 | 0.0 | 18160.0 |
| 5693. c2h5hco+c2h5o2=c2h5co+c2h5o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 11930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.78E+13 | -0.5 | 8941.0 |
| 5694. c2h5hco+ch3co3=c2h5co+ch3co3h | 3.01E+12 | 0.0 | 11930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.83E+12 | 0.0 | 26800.0 |
| 5695. c2h5chco+oh=nc3h7+co2 | 3.73E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5696. c2h5chco+h=nc3h7+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5697. c2h5chco+o=c3h6+co2 | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5698. ch3chcho+ho2=c2h5hco+o2 | 7.35E+12 | 0.0 | 1310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.81E+16 | -0.6 | 51910.0 |
| 5699. c3h6o=c2h4+ch2o | 6.00E+14 | 0.0 | 60000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.97E+11 | 0.0 | 50000.0 |
| 5700. c3h6o+oh=ch2o+c2h3+h2o | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5701. c3h6o+h=ch2o+c2h3+h2 | 2.63E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5702. c3h6o+o=ch2o+c2h3+oh | 8.43E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5703. c3h6o+ho2=ch2o+c2h3+h2o2 | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5704. c3h6o+ch3o2=ch2o+c2h3+ch3o2h | 1.00E+13 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5705. c3h6o+ch3=ch2o+c2h3+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5706. c3h6o1-3=c2h4+ch2o | 6.00E+14 | 0.0 | 60000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.97E+11 | 0.0 | 31080.0 |
| 5707. c3h6o1-3+oh=ch2o+c2h3+h2o | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5708. c3h6o1-3+o=ch2o+c2h3+oh | 8.43E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5709. c3h6o1-3+h=ch2o+c2h3+h2 | 2.63E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5710. c3h6o1-3+ch3o2=ch2o+c2h3+ch3o2h | 1.00E+13 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5711. c3h6o1-3+ho2=ch2o+c2h3+h2o2 | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5712. c3h6o1-3+ch3=ch2o+c2h3+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5713. ic3h7+oh=c3h6+h2o | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.98E+12 | 0.6 | 83820.0 |
| 5714. c3h6+nc3h7o2=ac3h5+nc3h7o2h | 3.24E+11 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5715. c3h6+ic3h7o2=ac3h5+ic3h7o2h | 3.24E+11 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5716. c3h6+ch3co3=ac3h5+ch3co3h | 3.24E+11 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5717. c3h6=ac3h5+h | 2.01E+61 | -13.3 | 118500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.89E+56 | -12.2 | 28080.0 |
| 5718. ic3h7o2+ch3co3=ic3h7o+ch3co2+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 5719. nc3h7o2+ch3co3=nc3h7o+ch3co2+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5720. c3h8+o2cho=nc3h7+ho2cho | 5.52E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E-08 | 5.5 | -1920.0 |
| 5721. c3h8+o2cho=ic3h7+ho2cho | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.84E-06 | 4.7 | -30.0 |
| 5722. ch3o2+c3h8=ch3o2h+nc3h7 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 5723. ch3o2+c3h8=ch3o2h+ic3h7 | 2.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 5724. nc3h7o2+c3h8=nc3h7o2h+nc3h7 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 5725. nc3h7o2+c3h8=nc3h7o2h+ic3h7 | 2.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 5726. ic3h7o2+c3h8=ic3h7o2h+nc3h7 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 5727. ic3h7o2+c3h8=ic3h7o2h+ic3h7 | 2.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 5728. c3h8+ch3co3=ic3h7+ch3co3h | 2.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 10000.0 |
| 5729. c3h8+ch3co3=nc3h7+ch3co3h | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 5730. tc3h5+o2=ac3h4+ho2 | 1.89E+30 | -5.6 | 15540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.57E+31 | -5.8 | 26610.0 |
| 5731. ac3h4+ho2=c2h4+co+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 14000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5732. ac3h4+c3h6=ac3h5+ac3h5 | 8.39E+17 | -1.3 | 33690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5733. tc3h5=c2h2+ch3 | 2.16E+10 | -8.3 | 45110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.61E+10 | -8.6 | 20330.0 |
| 5734. ac3h5+c2h5=c2h4+c3h6 | 4.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.94E+16 | -1.3 | 52800.0 |
| 5735. tc3h5+o2=ch2coch3+o | 3.81E+17 | -1.4 | 5580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+11 | 0.0 | 17500.0 |
| 5736. tc3h5+ch3=pc3h4+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.68E+16 | -0.9 | 71530.0 |
| 5737. ac3h4+c2h=c3h3+c2h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+16 | -1.4 | 53820.0 |
| 5738. pc3h4+o=c3h3+oh | 7.65E+08 | 1.5 | 8600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.18E+08 | 1.3 | 22470.0 |
| 5739. pc3h4+ac3h5=c3h3+c3h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 7700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.93E+16 | -1.7 | 37950.0 |
| 5740. c3h3+ch3=c2h5+c2h | 4.56E+17 | -1.1 | 48730.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5741. tc3h6oh=aceton+h | 5.00E+13 | 0.0 | 21860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5742. tc3h6oh=ic3h5oh+h | 6.20E+15 | -0.7 | 40340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+13 | 0.0 | 1560.0 |
| 5743. ic3h5oh=tc3h5+oh | 7.37E+19 | -0.9 | 109100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5744. tc3h6oh+o2=aceton+ho2 | 2.23E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.53E+17 | -1.2 | 25610.0 |
| 5745. c3h5oh+ho2=ch2cch2oh+h2o2 | 1.76E+09 | 0.3 | 22590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.01E+09 | 0.0 | 2583.0 |
| 5746. c3h5oh+oh=ch2cch2oh+h2o | 5.06E+12 | 0.0 | 5960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.46E+12 | 0.1 | 17410.0 |
| 5747. c3h5oh+h=ch2cch2oh+h2 | 3.90E+05 | 2.5 | 5821.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.59E+04 | 2.5 | 2121.0 |
| 5748. c3h5oh+o2=ch2cch2oh+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 60690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.83E+10 | 0.4 | -492.0 |
| 5749. c3h5oh+ch3=ch2cch2oh+ch4 | 2.40E+11 | 0.0 | 8030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.17E+11 | 0.1 | 4810.0 |
| 5750. c3h5oh=ch2cch2oh+h | 2.84E+19 | -1.1 | 111100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 5751. ch2cch2oh+o2=ch2oh+co+ch2o | 4.34E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5752. ch2cch2oh=c2h2+ch2oh | 2.16E+40 | -8.3 | 45110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.61E+40 | -8.6 | 20330.0 |
| 5753. ch2cch2oh=ac3h4+oh | 6.70E+16 | -1.1 | 42580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.50E+12 | 0.0 | 2000.0 |
| 5754. ch3chcho+ho2=ch3chocho+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.31E+19 | -1.5 | 28580.0 |
| 5755. ch3chocho=ch3hco+hco | 3.98E+13 | 0.0 | 9700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.34E+05 | 1.7 | 8282.0 |
| 5756. ch3chcho=acrol+h | 4.16E+12 | 0.0 | 34210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.50E+12 | 0.0 | 2900.0 |
| 5757. ch3chcho=ch3chco+h | 1.34E+13 | -0.2 | 33460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 5758. ch3chcho+h2=c2h5hco+h | 2.16E+05 | 2.4 | 18990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.64E+07 | 2.1 | 12110.0 |
| 5759. c2h5hco+ho2=ch3chcho+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.22E+10 | -0.1 | 2495.0 |
| 5760. ch3chcho+o2=ch3chco+ho2 | 1.81E+11 | 0.0 | 1840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.31E+13 | -0.5 | 19540.0 |
| 5761. ch3chcho+o2=acrol+ho2 | 2.72E+11 | 0.0 | 7240.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.46E+14 | -0.7 | 25880.0 |
| 5762. ch3chcho+o2=ch3hco+co+oh | 3.62E+10 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5763. c2h6+ch=c2h5+ch2 | 1.10E+14 | 0.0 | -260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.83E+10 | 0.6 | 440.0 |
| 5764. c2h4+ch3o2=c2h3+ch3o2h | 1.13E+13 | 0.0 | 30430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+12 | 0.0 | 11500.0 |
| 5765. c2h4+ch3o=c2h3+ch3oh | 1.20E+11 | 0.0 | 6750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 9000.0 |
| 5766. c2h4+ch3oco=mp3j | 2.11E+11 | 0.0 | 7350.0 |
| 5767. ch2hco+h=>ch3hco | 2.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 5768. co+ch3o=ch3oco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5769. co2+ch3=ch3oco | 1.50E+11 | 0.0 | 36730.0 |
| 5770. chocho+h=choco+h2 | 8.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 5771. hco+hco=chocho | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5772. o+c2h2=c2h+oh | 3.16E+15 | -0.6 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.44E+10 | 0.5 | -15570.0 |
| 5773. ch3o+ch3oh=ch2oh+ch3oh | 3.00E+11 | 0.0 | 4074.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.55E+05 | 1.7 | 10500.0 |
| 5774. hcco+oh=hco+hco | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.82E+13 | 0.0 | 40360.0 |
| 5775. hcco+o2=co2+hco | 2.40E+11 | 0.0 | -854.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.47E+14 | 0.0 | 133600.0 |
| 5776. ch3co+h=ch2co+h2 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.27E+09 | 0.0 | 83040.0 |
| 5777. ch3co+o=ch2co+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.27E+09 | 0.0 | 83040.0 |
| 5778. ch3co+ch3=ch2co+ch4 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.27E+09 | 0.0 | 83040.0 |
| 5779. h2o2+ch3co3=ho2+ch3co3h | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.89E+11 | 0.3 | 24730.0 |
| 5780. ch4+ch3co3=ch3+ch3co3h | 1.81E+11 | 0.0 | 18480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.88E+10 | 0.0 | 16490.0 |
| 5781. c2h4+ch3co3=c2h3+ch3co3h | 1.13E+13 | 0.0 | 30430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.19E+15 | -0.8 | 29570.0 |
| 5782. c2h6+ch3co3=c2h5+ch3co3h | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.73E+10 | 0.6 | 22640.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 5783. ch2o+ch3co3=hco+ch3co3h | 1.99E+12 | 0.0 | 11670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.60E+11 | 0.0 | 24830.0 |
| 5784. c2h4+ch3o2=c2h4o+ch3o | 2.82E+12 | 0.0 | 17110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5785. c2h4+c2h5o2=c2h4o+c2h5o | 2.82E+12 | 0.0 | 17110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5786. c2h4o+ch3o2=c2h3o+ch3o2h | 1.13E+13 | 0.0 | 30430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.78E+13 | -1.5 | 31560.0 |
| 5787. c2h4o+ch3o=c2h3o+ch3oh | 1.20E+11 | 0.0 | 6750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+09 | -0.9 | 25480.0 |
| 5788. c2h3o=ch2hco | 1.00E+14 | 0.0 | 14000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 1.7 | 28300.0 |
| 5789. acrol+ch3o2=c2h3co+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 11930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.79E+13 | -0.5 | 14860.0 |
| 5790. ho2cho=ocho+oh | 5.01E+14 | 0.0 | 40150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.32E+06 | 2.1 | 655.0 |
| 5791. ocho+m=h+co2+m | 2.44E+15 | -0.5 | 26500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+13 | 0.0 | 29000.0 |
| 5792. ocho+co=chooco | 1.50E+11 | 0.0 | 3000.0 |
| 5793. hco+co2=chooco | 1.50E+11 | 0.0 | 36730.0 |
| 5794. ch2o+m=co+h2+m | 1.83E+32 | -4.4 | 87120.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.07E+27 | -3.4 | 84350.0 |
| 5795. ch2oh+ch2o=ch3oh+hco | 1.29E-01 | 4.6 | 6596.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.63E+03 | 2.9 | 13110.0 |
| 5796. ch2o+o2cho=hco+ho2cho | 1.99E+12 | 0.0 | 11670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.33E+02 | 2.3 | 4687.0 |
| 5797. o2cho=hco+o2 | 7.77E+26 | -4.0 | 44230.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+11 | 0.0 | -1100.0 |
| 5798. IC8H18=AC8H17+h | 5.75E+17 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 5799. IC8H18=BC8H17+h | 3.30E+18 | -0.7 | 98730.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 5800. IC8H18=CC8H17+h | 1.15E+19 | -0.9 | 95430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 5801. IC8H18=DC8H17+h | 1.92E+17 | -0.4 | 100400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 5802. IC8H18=YC7H15+ch3 | 1.63E+28 | -2.8 | 83930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.63E+14 | 0.0 | -596.0 |
| 5803. IC8H18=PC7H15+ch3 | 1.38E+27 | -2.6 | 85860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.93E+15 | -0.3 | 0.0 |
| 5804. IC8H18=TC4H9+IC4H9 | 7.83E+30 | -3.9 | 84150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.59E+15 | -0.8 | 0.0 |
| 5805. IC8H18=NEOC5H11+ic3h7 | 2.46E+24 | -2.0 | 83400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.59E+15 | -0.8 | 0.0 |
| 5806. IC8H18+h=AC8H17+h2 | 7.34E+05 | 2.8 | 8147.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.10E+01 | 3.4 | 10480.0 |
| 5807. IC8H18+h=BC8H17+h2 | 5.74E+05 | 2.5 | 4124.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.94E+00 | 3.5 | 8954.0 |
| 5808. IC8H18+h=CC8H17+h2 | 6.02E+05 | 2.4 | 2583.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.10E+00 | 3.6 | 10710.0 |
| 5809. IC8H18+h=DC8H17+h2 | 1.88E+05 | 2.8 | 6280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.91E+01 | 3.4 | 9417.0 |
| 5810. IC8H18+o=AC8H17+oh | 8.55E+03 | 3.0 | 3123.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.12E-01 | 3.7 | 4048.0 |
| 5811. IC8H18+o=BC8H17+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.03E-01 | 3.7 | 5524.0 |
| 5812. IC8H18+o=CC8H17+oh | 3.83E+05 | 2.4 | 1140.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.00E-01 | 3.6 | 7858.0 |
| 5813. IC8H18+o=DC8H17+oh | 2.85E+05 | 2.5 | 3645.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.12E+01 | 3.1 | 5370.0 |
| 5814. IC8H18+oh=AC8H17+h2o | 2.63E+07 | 1.8 | 1431.0 |
| 5815. IC8H18+oh=BC8H17+h2o | 9.00E+05 | 2.0 | -1133.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.16E+02 | 2.9 | 18590.0 |
| 5816. IC8H18+oh=CC8H17+h2o | 1.70E+06 | 1.9 | -1450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.30E+01 | 3.0 | 21570.0 |
| 5817. IC8H18+oh=DC8H17+h2o | 1.78E+07 | 1.8 | 1431.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.94E+04 | 2.3 | 19460.0 |
| 5818. IC8H18+ch3=AC8H17+ch4 | 4.26E-14 | 8.1 | 4154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.70E-15 | 8.2 | 8031.0 |
| 5819. IC8H18+ch3=BC8H17+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.99E+02 | 2.8 | 13660.0 |
| 5820. IC8H18+ch3=CC8H17+ch4 | 6.01E-10 | 6.4 | 893.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.91E-12 | 7.1 | 10560.0 |
| 5821. IC8H18+ch3=DC8H17+ch4 | 1.47E-01 | 3.9 | 6808.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.79E-02 | 4.1 | 11480.0 |
| 5822. IC8H18+ho2=AC8H17+h2o2 | 6.12E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| 5823. IC8H18+ho2=BC8H17+h2o2 | 6.32E+01 | 3.4 | 13720.0 |
| 5824. IC8H18+ho2=CC8H17+h2o2 | 4.33E+02 | 3.0 | 120900.0 |
| 5825. IC8H18+ho2=DC8H17+h2o2 | 4.08E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| 5826. IC8H18+ch3o=AC8H17+ch3oh | 4.74E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 5827. IC8H18+ch3o=BC8H17+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.90E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 5828. IC8H18+ch3o=CC8H17+ch3oh | 1.90E+10 | 0.0 | 2800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 5200.0 |
| 5829. IC8H18+ch3o=DC8H17+ch3oh | 3.20E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 5830. IC8H18+o2=AC8H17+ho2 | 6.30E+13 | 0.0 | 50760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.30E+10 | 0.3 | -1592.0 |
| 5831. IC8H18+o2=BC8H17+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 48210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.89E+08 | 0.7 | -1649.0 |
| 5832. IC8H18+o2=CC8H17+ho2 | 7.00E+12 | 0.0 | 46060.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.28E+08 | 0.9 | -499.0 |
| 5833. IC8H18+o2=DC8H17+ho2 | 4.20E+13 | 0.0 | 50760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.58E+10 | 0.3 | -792.0 |
| 5834. IC8H18+c2h5=AC8H17+c2h6 | 1.50E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 5835. IC8H18+c2h5=BC8H17+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 5836. IC8H18+c2h5=CC8H17+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 7900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+11 | 0.0 | 21000.0 |
| 5837. IC8H18+c2h5=DC8H17+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 5838. IC8H18+c2h3=AC8H17+c2h4 | 1.50E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.57E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 5839. IC8H18+c2h3=BC8H17+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 5840. IC8H18+c2h3=CC8H17+c2h4 | 2.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+12 | 0.0 | 23000.0 |
| 5841. IC8H18+c2h3=DC8H17+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.57E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 5842. IC8H18+ch3o2=AC8H17+ch3o2h | 2.08E+00 | 4.0 | 18280.0 |
| 5843. IC8H18+ch3o2=BC8H17+ch3o2h | 1.02E+01 | 3.6 | 14810.0 |
| 5844. IC8H18+ch3o2=CC8H17+ch3o2h | 1.37E+02 | 3.1 | 13190.0 |
| 5845. IC8H18+ch3o2=DC8H17+ch3o2h | 1.39E+00 | 4.0 | 18280.0 |
| 5846. IC8H18+AC8H17O2=AC8H17+AC8H17O2H | 1.81E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5847. IC8H18+BC8H17O2=AC8H17+BC8H17O2H | 1.81E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5848. IC8H18+CC8H17O2=AC8H17+CC8H17O2H | 1.81E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5849. IC8H18+DC8H17O2=AC8H17+DC8H17O2H | 1.81E+13 | 0.0 | 20430.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5850. IC8H18+AC8H17O2=BC8H17+AC8H17O2H | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5851. IC8H18+BC8H17O2=BC8H17+BC8H17O2H | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5852. IC8H18+CC8H17O2=BC8H17+CC8H17O2H | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5853. IC8H18+DC8H17O2=BC8H17+DC8H17O2H | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5854. IC8H18+AC8H17O2=CC8H17+AC8H17O2H | 2.00E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5855. IC8H18+BC8H17O2=CC8H17+BC8H17O2H | 2.00E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5856. IC8H18+CC8H17O2=CC8H17+CC8H17O2H | 2.00E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5857. IC8H18+DC8H17O2=CC8H17+DC8H17O2H | 2.00E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5858. IC8H18+AC8H17O2=DC8H17+AC8H17O2H | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5859. IC8H18+BC8H17O2=DC8H17+BC8H17O2H | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5860. IC8H18+CC8H17O2=DC8H17+CC8H17O2H | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5861. IC8H18+DC8H17O2=DC8H17+DC8H17O2H | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 5862. IC8H18+o2cho=AC8H17+ho2cho | 2.52E+13 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.58E+02 | 2.3 | 3062.0 |
| 5863. IC8H18+o2cho=BC8H17+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.16E+01 | 2.7 | 2806.0 |
| 5864. IC8H18+o2cho=CC8H17+ho2cho | 2.80E+12 | 0.0 | 16010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.11E+00 | 2.9 | 4633.0 |
| 5865. IC8H18+o2cho=DC8H17+ho2cho | 1.68E+13 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.11E+03 | 2.3 | 3862.0 |
| 5866. IC8H18+IC4H6OH=AC8H17+IC4H7OH | 7.05E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.77E-01 | 3.9 | 6526.0 |
| 5867. IC8H18+IC4H6OH=BC8H17+IC4H7OH | 1.57E+02 | 3.3 | 18170.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E-02 | 4.3 | 7350.0 |
| 5868. IC8H18+IC4H6OH=CC8H17+IC4H7OH | 8.44E+01 | 3.3 | 17170.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E-03 | 4.5 | 9648.0 |
| 5869. IC8H18+IC4H6OH=DC8H17+IC4H7OH | 4.70E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.53E-01 | 3.9 | 7326.0 |
| 5870. XC7H14+ch3=AC8H17 | 1.30E+03 | 2.5 | 8520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+13 | 0.3 | 28320.0 |
| 5871. IC4H8+IC4H9=AC8H17 | 6.09E+02 | 2.5 | 8520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.46E+14 | -0.1 | 26780.0 |
| 5872. YC7H14+ch3=BC8H17 | 1.30E+03 | 2.5 | 8520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.70E+12 | 0.5 | 28210.0 |
| 5873. OC7H14+ch3=BC8H17 | 1.30E+03 | 2.5 | 8520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.60E+10 | 0.9 | 29410.0 |
| 5874. IC4H8+TC4H9=CC8H17 | 6.09E+02 | 2.5 | 6130.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.24E+14 | -0.1 | 25890.0 |
| 5875. PC7H14+ch3=DC8H17 | 1.30E+03 | 2.5 | 8520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.84E+11 | 0.7 | 29570.0 |
| 5876. c3h6+NEOC5H11=DC8H17 | 4.00E+02 | 2.5 | 8520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.73E+08 | 1.6 | 27020.0 |
| 5877. BC8H17=IC8H16+h | 1.84E+12 | 0.4 | 35240.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 5878. CC8H17=IC8H16+h | 9.00E+11 | 0.6 | 37150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+12 | 0.5 | 1230.0 |
| 5879. CC8H17=JC8H16+h | 4.21E+11 | 0.8 | 36690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+12 | 0.5 | 1230.0 |
| 5880. CC8H17+o2=IC8H16+ho2 | 3.00E-19 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 5881. CC8H17+o2=JC8H16+ho2 | 1.50E-19 | 0.0 | 4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 5882. DC8H17=JC8H16+h | 1.48E+13 | 0.2 | 33090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 5883. AC8H17=DC8H17 | 1.39E+11 | 0.0 | 15400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.16E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 5884. AC8H17=CC8H17 | 3.71E+11 | 0.0 | 20400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.86E+10 | 0.6 | 26190.0 |
| 5885. DC8H17+o2=JC8H16+ho2 | 2.00E-18 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 5886. AC8H17+ho2=AC8H17O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.18E+15 | -0.5 | 25880.0 |
| 5887. BC8H17+ho2=BC8H17O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.04E+17 | -1.1 | 27870.0 |
| 5888. CC8H17+ho2=CC8H17O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.91E+18 | -1.4 | 26980.0 |
| 5889. DC8H17+ho2=DC8H17O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.09E+15 | -0.5 | 25080.0 |
| 5890. AC8H17+ch3o2=AC8H17O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.36E+14 | -0.2 | 30120.0 |
| 5891. BC8H17+ch3o2=BC8H17O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+16 | -0.8 | 32110.0 |
| 5892. CC8H17+ch3o2=CC8H17O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.07E+17 | -1.1 | 31220.0 |
| 5893. DC8H17+ch3o2=DC8H17O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.84E+13 | -0.2 | 29320.0 |
| 5894. AC8H17O2=AC8H17+o2 | 3.46E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5895. BC8H17O2=BC8H17+o2 | 1.05E+23 | -2.3 | 38840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5896. CC8H17O2=CC8H17+o2 | 3.62E+24 | -2.6 | 36010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 5897. DC8H17O2=DC8H17+o2 | 3.46E+20 | -1.6 | 34920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5898. AC8H17+AC8H17O2=AC8H17O+AC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.48E+13 | -0.2 | 29360.0 |
| 5899. AC8H17+BC8H17O2=AC8H17O+BC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.99E+13 | -0.1 | 28230.0 |
| 5900. AC8H17+CC8H17O2=AC8H17O+CC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.35E+13 | -0.2 | 30170.0 |
| 5901. AC8H17+DC8H17O2=AC8H17O+DC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.25E+13 | -0.2 | 29360.0 |
| 5902. BC8H17+AC8H17O2=BC8H17O+AC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.04E+15 | -0.8 | 31350.0 |
| 5903. BC8H17+BC8H17O2=BC8H17O+BC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.96E+15 | -0.8 | 30220.0 |
| 5904. BC8H17+CC8H17O2=BC8H17O+CC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.07E+15 | -0.8 | 32160.0 |
| 5905. BC8H17+DC8H17O2=BC8H17O+DC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.54E+15 | -0.8 | 31350.0 |
| 5906. CC8H17+AC8H17O2=CC8H17O+AC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.46E+17 | -1.1 | 30460.0 |
| 5907. CC8H17+BC8H17O2=CC8H17O+BC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.12E+17 | -1.0 | 29330.0 |
| 5908. CC8H17+CC8H17O2=CC8H17O+CC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.80E+16 | -1.1 | 31270.0 |
| 5909. CC8H17+DC8H17O2=CC8H17O+DC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.32E+16 | -1.1 | 30460.0 |
| 5910. DC8H17+AC8H17O2=DC8H17O+AC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.25E+13 | -0.2 | 28560.0 |
| 5911. DC8H17+BC8H17O2=DC8H17O+BC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+13 | -0.1 | 27430.0 |
| 5912. DC8H17+CC8H17O2=DC8H17O+CC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.18E+13 | -0.2 | 29370.0 |
| 5913. DC8H17+DC8H17O2=DC8H17O+DC8H17O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.63E+13 | -0.2 | 28560.0 |
| 5914. AC8H17O2+ho2=AC8H17O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.07E+13 | -0.8 | 33620.0 |
| 5915. BC8H17O2+ho2=BC8H17O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.75E+13 | -0.8 | 33610.0 |
| 5916. CC8H17O2+ho2=CC8H17O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.75E+13 | -0.8 | 33610.0 |
| 5917. DC8H17O2+ho2=DC8H17O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.07E+13 | -0.8 | 33620.0 |
| 5918. h2o2+AC8H17O2=ho2+AC8H17O2H | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 5919. h2o2+BC8H17O2=ho2+BC8H17O2H | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 5920. h2o2+CC8H17O2=ho2+CC8H17O2H | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 5921. h2o2+DC8H17O2=ho2+DC8H17O2H | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 5922. AC8H17O2+ch3o2=AC8H17O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5923. BC8H17O2+ch3o2=BC8H17O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5924. CC8H17O2+ch3o2=CC8H17O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5925. DC8H17O2+ch3o2=DC8H17O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5926. AC8H17O2+AC8H17O2=o2+AC8H17O+AC8H17O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5927. AC8H17O2+BC8H17O2=AC8H17O+BC8H17O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5928. AC8H17O2+CC8H17O2=AC8H17O+CC8H17O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5929. AC8H17O2+DC8H17O2=AC8H17O+DC8H17O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5930. BC8H17O2+BC8H17O2=o2+BC8H17O+BC8H17O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5931. BC8H17O2+CC8H17O2=BC8H17O+CC8H17O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5932. BC8H17O2+DC8H17O2=BC8H17O+DC8H17O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5933. CC8H17O2+CC8H17O2=o2+CC8H17O+CC8H17O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5934. CC8H17O2+DC8H17O2=CC8H17O+DC8H17O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5935. DC8H17O2+DC8H17O2=o2+DC8H17O+DC8H17O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5936. AC8H17O2=AC8H16OOH-A | 7.50E+10 | 0.0 | 24000.0 |
| 5937. AC8H17O2=AC8H16OOH-B | 2.50E+10 | 0.0 | 20450.0 |
| 5938. AC8H17O2=AC8H16OOH-C | 1.56E+09 | 0.0 | 16650.0 |
| 5939. AC8H17O2=AC8H16OOH-D | 1.17E+09 | 0.0 | 25150.0 |
| 5940. BC8H17O2=BC8H16OOH-A | 1.12E+11 | 0.0 | 24000.0 |
| 5941. BC8H17O2=BC8H16OOH-C | 1.00E+11 | 0.0 | 23700.0 |
| 5942. BC8H17O2=BC8H16OOH-D | 7.50E+10 | 0.0 | 24000.0 |
| 5943. CC8H17O2=CC8H16OOH-A | 1.41E+10 | 0.0 | 21950.0 |
| 5944. CC8H17O2=CC8H16OOH-B | 2.00E+11 | 0.0 | 26450.0 |
| 5945. CC8H17O2=CC8H16OOH-D | 6.00E+11 | 0.0 | 29000.0 |
| 5946. DC8H17O2=DC8H16OOH-A | 1.76E+09 | 0.0 | 25150.0 |
| 5947. DC8H17O2=DC8H16OOH-B | 2.50E+10 | 0.0 | 20450.0 |
| 5948. DC8H17O2=DC8H16OOH-C | 1.00E+11 | 0.0 | 23700.0 |
| 5949. DC8H17O2=DC8H16OOH-D | 3.75E+10 | 0.0 | 24000.0 |
| 5950. BC8H17O2=IC8H16+ho2 | 8.53E+35 | -7.2 | 41490.0 |
| 5951. CC8H17O2=IC8H16+ho2 | 1.00E+39 | -8.1 | 42490.0 |
| 5952. CC8H17O2=JC8H16+ho2 | 2.02E+43 | -9.4 | 43490.0 |
| 5953. DC8H17O2=JC8H16+ho2 | 8.53E+35 | -7.2 | 41490.0 |
| 5954. BC8H17O=TC4H9+ic3h7cho | 3.11E+26 | -3.6 | 15980.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5955. BC8H17O=ic3h7+TC4H9CHO | 3.33E+23 | -2.9 | 18470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+10 | 0.0 | 12900.0 |
| 5956. CC8H17O=NEOC5H11+aceton | 1.21E+20 | -1.7 | 12340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5957. DC8H17O=PC7H15+ch2o | 6.08E+22 | -2.7 | 20470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 5958. AC8H17O2H=AC8H17O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+07 | 1.9 | -6742.0 |
| 5959. BC8H17O2H=BC8H17O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.46E+07 | 2.0 | -7862.0 |
| 5960. CC8H17O2H=CC8H17O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.27E+07 | 1.9 | -5922.0 |
| 5961. DC8H17O2H=DC8H17O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.77E+06 | 1.9 | -6742.0 |
| 5962. AC8H17O=YC7H15+ch2o | 5.69E+24 | -3.2 | 19140.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 1190.0 |
| 5963. AC8H16OOH-A=IC8ETERAA+oh | 3.00E+11 | 0.0 | 14250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5964. AC8H16OOH-B=IC8ETERAB+oh | 3.00E+11 | 0.0 | 14250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5965. AC8H16OOH-C=IC8ETERAC+oh | 2.74E+10 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5966. AC8H16OOH-D=IC8ETERAD+oh | 3.17E+09 | 0.0 | 1800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5967. BC8H16OOH-C=IC8ETERBC+oh | 1.80E+12 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5968. BC8H16OOH-A=IC8ETERAB+oh | 3.00E+11 | 0.0 | 14250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5969. BC8H16OOH-D=IC8ETERBD+oh | 3.00E+11 | 0.0 | 14250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5970. CC8H16OOH-D=IC8ETERCD+oh | 1.80E+12 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5971. CC8H16OOH-B=IC8ETERBC+oh | 1.80E+12 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5972. CC8H16OOH-A=IC8ETERAC+oh | 2.74E+10 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5973. DC8H16OOH-C=IC8ETERCD+oh | 1.80E+12 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5974. DC8H16OOH-D=IC8ETERDD+oh | 3.00E+11 | 0.0 | 14250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5975. DC8H16OOH-B=IC8ETERBD+oh | 3.00E+11 | 0.0 | 14250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5976. DC8H16OOH-A=IC8ETERAD+oh | 3.17E+09 | 0.0 | 1800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5977. BC8H16OOH-C=IC8H16+ho2 | 1.53E+20 | -2.4 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 5978. CC8H16OOH-D=JC8H16+ho2 | 1.17E+22 | -2.7 | 16740.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 5979. CC8H16OOH-B=IC8H16+ho2 | 1.13E+21 | -2.5 | 22960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 5980. DC8H16OOH-C=JC8H16+ho2 | 1.88E+18 | -1.8 | 14960.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 5981. AC8H16OOH-A=oh+ch2o+XC7H14 | 9.09E+17 | -1.3 | 28580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5982. AC8H16OOH-B=oh+ch2o+YC7H14 | 1.25E+17 | -1.1 | 28210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5983. BC8H16OOH-A=oh+ic3h7cho+IC4H8 | 3.12E+21 | -2.4 | 26330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5984. BC8H16OOH-D=oh+TC4H9CHO+c3h6 | 1.29E+21 | -2.2 | 32970.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5985. DC8H16OOH-B=oh+ch2o+OC7H14 | 1.12E+15 | -0.5 | 30930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5986. DC8H16OOH-D=oh+ch2o+PC7H14 | 8.01E+15 | -0.7 | 30890.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 5987. AC8H16OOH-A=XC7H13OOH-X1+ch3 | 2.81E+17 | -1.2 | 28530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 10900.0 |
| 5988. AC8H16OOH-A=IC4H7OOH+TC4H9 | 1.51E+24 | -3.1 | 26840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 5989. AC8H16OOH-B=YC7H13OOH-X1+ch3 | 1.03E+16 | -0.8 | 27450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 10900.0 |
| 5990. AC8H16OOH-B=OC7H13OOH-N+ch3 | 3.76E+14 | -0.6 | 27330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 10200.0 |
| 5991. BC8H16OOH-A=XC7H13OOH-Z+ch3 | 2.14E+16 | -0.8 | 29150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5992. BC8H16OOH-D=PC7H13OOH-O+ch3 | 1.40E+15 | -0.7 | 31780.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 5993. DC8H16OOH-B=OC7H13OOH-Q+ch3 | 2.49E+14 | -0.5 | 26930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 5994. DC8H16OOH-B=YC7H13OOH-X2+ch3 | 4.77E+17 | -1.0 | 29600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 13600.0 |
| 5995. DC8H16OOH-D=NEOC5H11+AC3H5OOH | 2.01E+22 | -2.4 | 30980.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 5996. AC8H16OOH-C=IC4H8+IC4H8O2H-T | 5.57E+21 | -2.4 | 27120.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 5997. CC8H16OOH-A=IC4H8+TC4H8O2H-I | 1.73E+23 | -2.8 | 29800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5998. CC8H16OOH-A=XC7H13OOH-Y2+ch3 | 3.52E+17 | -1.3 | 27140.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 5999. AC8H16OOH-D=c3h6+NEOC5H10OOH | 2.02E+19 | -1.9 | 28830.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+11 | -0.3 | 9864.0 |
| 6000. AC8H16OOH-AO2=AC8H16OOH-A+o2 | 3.25E+20 | -1.6 | 34920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6001. AC8H16OOH-BO2=AC8H16OOH-B+o2 | 1.36E+23 | -2.4 | 37280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6002. AC8H16OOH-CO2=AC8H16OOH-C+o2 | 3.26E+24 | -2.5 | 36700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6003. AC8H16OOH-DO2=AC8H16OOH-D+o2 | 3.25E+20 | -1.6 | 34920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6004. BC8H16OOH-CO2=BC8H16OOH-C+o2 | 1.53E+24 | -2.4 | 36620.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6005. BC8H16OOH-AO2=BC8H16OOH-A+o2 | 2.98E+20 | -1.6 | 34900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6006. BC8H16OOH-DO2=BC8H16OOH-D+o2 | 2.98E+20 | -1.6 | 34900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6007. CC8H16OOH-DO2=CC8H16OOH-D+o2 | 1.68E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6008. CC8H16OOH-BO2=CC8H16OOH-B+o2 | 1.11E+23 | -2.3 | 38060.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6009. CC8H16OOH-AO2=CC8H16OOH-A+o2 | 3.36E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6010. DC8H16OOH-CO2=DC8H16OOH-C+o2 | 3.27E+24 | -2.5 | 37500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6011. DC8H16OOH-DO2=DC8H16OOH-D+o2 | 1.63E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6012. DC8H16OOH-BO2=DC8H16OOH-B+o2 | 1.36E+23 | -2.4 | 38080.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6013. DC8H16OOH-AO2=DC8H16OOH-A+o2 | 3.25E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6014. AC8H16OOH-AO2=IC8KETAA+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21000.0 |
| 6015. AC8H16OOH-BO2=IC8KETAB+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21000.0 |
| 6016. AC8H16OOH-CO2=IC8KETAC+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 18950.0 |
| 6017. AC8H16OOH-DO2=IC8KETAD+oh | 3.91E+08 | 0.0 | 22150.0 |
| 6018. BC8H16OOH-CO2=IC8KETBC+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23450.0 |
| 6019. BC8H16OOH-AO2=IC8KETBA+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17450.0 |
| 6020. BC8H16OOH-DO2=IC8KETBD+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17450.0 |
| 6021. DC8H16OOH-CO2=IC8KETDC+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26000.0 |
| 6022. DC8H16OOH-DO2=IC8KETDD+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21000.0 |
| 6023. DC8H16OOH-BO2=IC8KETDB+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21000.0 |
| 6024. DC8H16OOH-AO2=IC8KETDA+oh | 3.91E+08 | 0.0 | 22150.0 |
| 6025. CC8H16OH-B=IC8H16+oh | 5.84E+16 | -1.0 | 35400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6026. BC8H16OH-C=IC8H16+oh | 6.33E+15 | -0.8 | 34880.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6027. CC8H16OH-D=JC8H16+oh | 8.35E+17 | -1.3 | 32550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6028. DC8H16OH-C=JC8H16+oh | 1.03E+14 | -0.4 | 29950.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6029. CC8H16OH-D=NEOC5H11+ic3h5oh | 1.62E+22 | -2.5 | 31020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 6030. BC8H16OH-C=TC4H9+IC4H7OH | 3.44E+22 | -2.6 | 32690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 6031. CC8H16OH-BO2=CC8H16OH-B+o2 | 7.68E+20 | -2.0 | 35510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6032. BC8H16OH-CO2=BC8H16OH-C+o2 | 1.03E+22 | -2.2 | 34770.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6033. CC8H16OH-DO2=CC8H16OH-D+o2 | 1.96E+18 | -1.4 | 34310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6034. DC8H16OH-CO2=DC8H16OH-C+o2 | 1.64E+22 | -2.2 | 34730.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6035. CC8H16OH-BO2=CC8H16O-BO2H | 1.20E+12 | 0.0 | 18900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+15 | -0.9 | 3590.0 |
| 6036. BC8H16OH-CO2=BC8H16O-CO2H | 1.20E+12 | 0.0 | 18900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.38E+15 | -0.9 | 3580.0 |
| 6037. CC8H16OH-DO2=CC8H16O-DO2H | 1.20E+12 | 0.0 | 18900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+15 | -0.9 | 3580.0 |
| 6038. DC8H16OH-CO2=DC8H16O-CO2H | 1.20E+12 | 0.0 | 18900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+15 | -0.9 | 3590.0 |
| 6039. CC8H16O-BO2H=TC4H9CHO+aceton+oh | 3.86E+23 | -3.1 | 13000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6040. BC8H16O-CO2H=TC4H9CHO+aceton+oh | 1.61E+23 | -2.9 | 15090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6041. CC8H16O-DO2H=NEOC5H11COCH3+ch2o+oh | 8.32E+18 | -1.5 | 17910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6042. DC8H16O-CO2H=NEOC5H11COCH3+ch2o+oh | 5.85E+20 | -2.1 | 16880.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6043. IC8H16+h=IC8H15+h2 | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.42E+12 | 0.0 | 19570.0 |
| 6044. JC8H16+h=IC8H15+h2 | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+12 | 0.2 | 19110.0 |
| 6045. IC8H16+o=IC8H15+oh | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.80E+12 | 0.0 | 18160.0 |
| 6046. JC8H16+o=IC8H15+oh | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.42E+11 | 0.2 | 17700.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6047. IC8H16+oh=IC8H15+h2o | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.64E+13 | -0.1 | 34460.0 |
| 6048. JC8H16+oh=IC8H15+h2o | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.71E+13 | 0.1 | 34000.0 |
| 6049. IC8H15=IC4H8+IC4H7-I1 | 8.99E+24 | -3.0 | 53600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6050. IC8H16+ch3=IC8H15+ch4 | 2.00E+12 | 0.0 | 7300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.69E+14 | -0.4 | 24510.0 |
| 6051. JC8H16+ch3=IC8H15+ch4 | 2.00E+12 | 0.0 | 7300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.91E+13 | -0.2 | 24050.0 |
| 6052. IC8H16+oh=aceton+NEOC5H11 | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6053. JC8H16+oh=ch2o+PC7H15 | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6054. JC8H16+o=ch2o+PC7H14 | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6055. IC8ETERAA+oh=XC7H14+hco+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6056. IC8ETERAB+oh=YC7H14+hco+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6057. IC8ETERAC+oh=IC4H8+tc3h6cho+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6058. IC8ETERAD+oh=c3h6+TC4H8CHO+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6059. IC8ETERBC+oh=ic3h5cho+TC4H9+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6060. IC8ETERBD+oh=OC7H14+hco+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6061. IC8ETERCD+oh=ic3h5cho+TC4H9+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6062. IC8ETERDD+oh=acrol+NEOC5H11+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6063. IC8ETERAA+oh=ic3h5cho+IC4H9+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6064. IC8ETERAB+oh=IC4H8+ic3h7co+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6065. IC8ETERAC+oh=ch2o+YC7H13-Y2+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6066. IC8ETERAD+oh=IC4H8+ic3h6cho+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6067. IC8ETERBC+oh=ic3h6co+TC4H9+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6068. IC8ETERBD+oh=c3h6+TC4H9CO+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6069. IC8ETERCD+oh=ch2o+PC7H13-O+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6070. IC8ETERDD+oh=ch2o+PC7H13-O+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6071. IC8ETERAA+ho2=XC7H14+hco+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6072. IC8ETERAB+ho2=YC7H14+hco+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6073. IC8ETERAC+ho2=IC4H8+tc3h6cho+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6074. IC8ETERAD+ho2=c3h6+TC4H8CHO+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6075. IC8ETERBC+ho2=ic3h5cho+TC4H9+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6076. IC8ETERBD+ho2=OC7H14+hco+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6077. IC8ETERCD+ho2=ic3h5cho+TC4H9+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6078. IC8ETERDD+ho2=acrol+NEOC5H11+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6079. IC8ETERAA+ho2=ic3h5cho+IC4H9+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6080. IC8ETERAB+ho2=IC4H8+ic3h7co+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6081. IC8ETERAC+ho2=ch2o+YC7H13-Y2+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6082. IC8ETERAD+ho2=IC4H8+ic3h6cho+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6083. IC8ETERBC+ho2=ic3h6co+TC4H9+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6084. IC8ETERBD+ho2=c3h6+TC4H9CO+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6085. IC8ETERCD+ho2=ch2o+PC7H13-O+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6086. IC8ETERDD+ho2=ch2o+PC7H13-O+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6087. IC8KETAA=ch2o+DC6H12CHO-D+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6088. IC8KETAB=ic3h7cho+tc3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6089. IC8KETAC=aceton+TC4H8CHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6090. IC8KETAD=ch2o+DC6H12CHO-B+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6091. IC8KETBC=aceton+TC4H9CO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6092. IC8KETBA=ch2o+IC3H7COC3H6-T+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6093. IC8KETBD=ch2o+TC4H9COC2H4S+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6094. IC8KETDC=NEOC5H11COCH3+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6095. IC8KETDD=ch2o+HC6H12CHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6096. IC8KETDB=TC4H9CHO+CH3CHCHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6097. IC8KETDA=BC6H12CHO-D+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6098. NEOC7H16=NC7H15+h | 2.02E+17 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6099. NEOC7H16=OC7H15+h | 1.04E+18 | -0.7 | 98710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6100. NEOC7H16=PC7H15+h | 1.04E+18 | -0.7 | 98710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6101. NEOC7H16=QC7H15+h | 6.73E+16 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6102. NEOC7H16=BC6H13+ch3 | 4.75E+26 | -2.8 | 87840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6103. NEOC7H16=HC6H13+ch3 | 1.75E+22 | -1.8 | 89280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6104. NEOC7H16=NEOC5H11+c2h5 | 5.10E+19 | -0.9 | 87030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6105. NEOC7H16=TC4H9+nc3h7 | 1.07E+28 | -3.2 | 87260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6106. NEOC7H16+h=NC7H15+h2 | 9.79E+05 | 2.8 | 8147.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.00E+01 | 3.4 | 10490.0 |
| 6107. NEOC7H16+h=OC7H15+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.80E+01 | 3.4 | 9324.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6108. NEOC7H16+h=PC7H15+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.80E+01 | 3.4 | 9324.0 |
| 6109. NEOC7H16+h=QC7H15+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.01E+01 | 3.4 | 8621.0 |
| 6110. NEOC7H16+ch3=NC7H15+ch4 | 1.36E+00 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.85E-02 | 3.8 | 11040.0 |
| 6111. NEOC7H16+ch3=OC7H15+ch4 | 8.40E+04 | 2.1 | 7574.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+03 | 2.7 | 13970.0 |
| 6112. NEOC7H16+ch3=PC7H15+ch4 | 8.40E+04 | 2.1 | 7574.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+03 | 2.7 | 13970.0 |
| 6113. NEOC7H16+ch3=QC7H15+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.84E-02 | 3.8 | 11040.0 |
| 6114. NEOC7H16+c2h5=NC7H15+c2h6 | 1.50E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6115. NEOC7H16+c2h5=OC7H15+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 6116. NEOC7H16+c2h5=PC7H15+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 6117. NEOC7H16+c2h5=QC7H15+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6118. NEOC7H16+NC7H15=OC7H15+NEOC7H16 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6119. NEOC7H16+NC7H15=PC7H15+NEOC7H16 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6120. NEOC7H16+NC7H15=QC7H15+NEOC7H16 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6121. NEOC7H16+OC7H15=PC7H15+NEOC7H16 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 6122. NEOC7H16+OC7H15=QC7H15+NEOC7H16 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 6123. NEOC7H16+PC7H15=QC7H15+NEOC7H16 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 6124. NEOC7H16+o=NC7H15+oh | 4.05E+07 | 2.0 | 5136.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.52E+03 | 2.6 | 6065.0 |
| 6125. NEOC7H16+o=OC7H15+oh | 5.95E+05 | 2.4 | 2846.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.32E+00 | 3.4 | 6287.0 |
| 6126. NEOC7H16+o=PC7H15+oh | 5.95E+05 | 2.4 | 2846.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.32E+00 | 3.4 | 6287.0 |
| 6127. NEOC7H16+o=QC7H15+oh | 1.05E+06 | 2.4 | 4766.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+02 | 3.0 | 5695.0 |
| 6128. NEOC7H16+oh=NC7H15+h2o | 2.37E+07 | 1.8 | 298.1 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.80E+04 | 2.3 | 17530.0 |
| 6129. NEOC7H16+oh=OC7H15+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.89E+03 | 2.5 | 19710.0 |
| 6130. NEOC7H16+oh=PC7H15+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.89E+03 | 2.5 | 19710.0 |
| 6131. NEOC7H16+oh=QC7H15+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+07 | 1.5 | 18820.0 |
| 6132. NEOC7H16+ho2=NC7H15+h2o2 | 8.10E+04 | 2.5 | 16680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.35E+03 | 2.4 | 3021.0 |
| 6133. NEOC7H16+ho2=OC7H15+h2o2 | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.71E+02 | 2.8 | 3715.0 |
| 6134. NEOC7H16+ho2=PC7H15+h2o2 | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.71E+02 | 2.8 | 3715.0 |
| 6135. NEOC7H16+ho2=QC7H15+h2o2 | 4.05E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.02E+03 | 2.4 | 3031.0 |
| 6136. NEOC7H16+ch3o=NC7H15+ch3oh | 4.80E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6137. NEOC7H16+ch3o=OC7H15+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.90E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 6138. NEOC7H16+ch3o=PC7H15+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.90E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 6139. NEOC7H16+ch3o=QC7H15+ch3oh | 1.60E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6140. NEOC7H16+o2=NC7H15+ho2 | 6.30E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.36E+10 | 0.3 | 457.0 |
| 6141. NEOC7H16+o2=OC7H15+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 50160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+09 | 0.6 | 319.0 |
| 6142. NEOC7H16+o2=PC7H15+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 50160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+09 | 0.6 | 319.0 |
| 6143. NEOC7H16+o2=QC7H15+ho2 | 2.10E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.36E+10 | 0.3 | 457.0 |
| 6144. NEOC7H16+c2h3=NC7H15+c2h4 | 1.50E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 6145. NEOC7H16+c2h3=OC7H15+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 6146. NEOC7H16+c2h3=PC7H15+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 6147. NEOC7H16+c2h3=QC7H15+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 6148. NEOC7H16+ch3o2=NC7H15+ch3o2h | 8.10E+04 | 2.5 | 16680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.52E+04 | 2.0 | 1426.0 |
| 6149. NEOC7H16+ch3o2=OC7H15+ch3o2h | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.17E+03 | 2.3 | 2120.0 |
| 6150. NEOC7H16+ch3o2=PC7H15+ch3o2h | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.17E+03 | 2.3 | 2120.0 |
| 6151. NEOC7H16+ch3o2=QC7H15+ch3o2h | 4.05E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.77E+04 | 2.0 | 1436.0 |
| 6152. NEOC7H16+NC7H15O2=NC7H15+NC7H15O2H | 2.52E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6153. NEOC7H16+OC7H15O2=NC7H15+OC7H15O2H | 2.52E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6154. NEOC7H16+PC7H15O2=NC7H15+PC7H15O2H | 2.52E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6155. NEOC7H16+QC7H15O2=NC7H15+QC7H15O2H | 2.52E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6156. NEOC7H16+NC7H15O2=OC7H15+NC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6157. NEOC7H16+OC7H15O2=OC7H15+OC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6158. NEOC7H16+PC7H15O2=OC7H15+PC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6159. NEOC7H16+QC7H15O2=OC7H15+QC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6160. NEOC7H16+NC7H15O2=PC7H15+NC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6161. NEOC7H16+OC7H15O2=PC7H15+OC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6162. NEOC7H16+PC7H15O2=PC7H15+PC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6163. NEOC7H16+QC7H15O2=PC7H15+QC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6164. NEOC7H16+NC7H15O2=QC7H15+NC7H15O2H | 8.40E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6165. NEOC7H16+OC7H15O2=QC7H15+OC7H15O2H | 8.40E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6166. NEOC7H16+PC7H15O2=QC7H15+PC7H15O2H | 8.40E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6167. NEOC7H16+QC7H15O2=QC7H15+QC7H15O2H | 8.40E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6168. NEOC7H16+o2cho=NC7H15+ho2cho | 2.52E+13 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.74E+02 | 2.3 | 3066.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6169. NEOC7H16+o2cho=OC7H15+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.47E+01 | 2.6 | 2829.0 |
| 6170. NEOC7H16+o2cho=PC7H15+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.47E+01 | 2.6 | 2829.0 |
| 6171. NEOC7H16+o2cho=QC7H15+ho2cho | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.74E+02 | 2.3 | 3066.0 |
| 6172. C7H16-24=XC7H15+h | 6.73E+16 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6173. C7H16-24=YC7H15+h | 2.63E+18 | -0.9 | 96690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6174. C7H16-24=ZC7H15+h | 9.93E+17 | -0.7 | 98710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6175. C7H16-24=DC6H13+ch3 | 2.33E+24 | -2.2 | 89140.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6176. C7H16-24=ic3h7+IC4H9 | 2.40E+25 | -2.5 | 88320.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6177. C7H16-24+h=XC7H15+h2 | 3.76E+05 | 2.8 | 6280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.05E+01 | 3.4 | 8612.0 |
| 6178. C7H16-24+h=YC7H15+h2 | 1.20E+06 | 2.4 | 2583.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.60E+00 | 3.5 | 9453.0 |
| 6179. C7H16-24+h=ZC7H15+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.89E+01 | 3.4 | 9324.0 |
| 6180. C7H16-24+ch3=XC7H15+ch4 | 1.81E+00 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.54E-01 | 3.8 | 11030.0 |
| 6181. C7H16-24+ch3=YC7H15+ch4 | 1.20E-09 | 6.4 | 893.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.01E-12 | 7.1 | 9303.0 |
| 6182. C7H16-24+ch3=ZC7H15+ch4 | 8.40E+04 | 2.1 | 7574.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.11E+03 | 2.7 | 13970.0 |
| 6183. C7H16-24+c2h5=XC7H15+c2h6 | 2.00E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6184. C7H16-24+c2h5=YC7H15+c2h6 | 2.00E+11 | 0.0 | 7900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+11 | 0.0 | 21000.0 |
| 6185. C7H16-24+c2h5=ZC7H15+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 6186. C7H16-24+o=XC7H15+oh | 5.39E+07 | 2.0 | 5136.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.06E+03 | 2.6 | 6056.0 |
| 6187. C7H16-24+o=YC7H15+oh | 7.94E+05 | 2.4 | 1150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.28E+00 | 3.5 | 6608.0 |
| 6188. C7H16-24+o=ZC7H15+oh | 5.95E+05 | 2.4 | 2846.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.53E+00 | 3.4 | 6287.0 |
| 6189. C7H16-24+oh=XC7H15+h2o | 2.11E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.80E+07 | 1.5 | 18810.0 |
| 6190. C7H16-24+oh=YC7H15+h2o | 1.15E+10 | 0.5 | 63.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.17E+11 | 0.5 | 21600.0 |
| 6191. C7H16-24+oh=ZC7H15+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.40E+05 | 1.9 | 21910.0 |
| 6192. C7H16-24+ho2=XC7H15+h2o2 | 1.62E+05 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.01E+04 | 2.4 | 3022.0 |
| 6193. C7H16-24+ho2=YC7H15+h2o2 | 1.50E+04 | 2.5 | 12260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.76E+01 | 3.0 | 3129.0 |
| 6194. C7H16-24+ho2=ZC7H15+h2o2 | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.94E+02 | 2.8 | 3715.0 |
| 6195. C7H16-24+ch3o=XC7H15+ch3oh | 6.40E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6196. C7H16-24+ch3o=YC7H15+ch3oh | 3.80E+10 | 0.0 | 2800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 5200.0 |
| 6197. C7H16-24+ch3o=ZC7H15+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.90E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 6198. C7H16-24+o2=XC7H15+ho2 | 8.40E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.43E+10 | 0.3 | 448.0 |
| 6199. C7H16-24+o2=YC7H15+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 48000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.02E+08 | 0.8 | 186.0 |
| 6200. C7H16-24+o2=ZC7H15+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 50160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+09 | 0.6 | 319.0 |
| 6201. C7H16-24+c2h3=XC7H15+c2h4 | 2.00E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 6202. C7H16-24+c2h3=YC7H15+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 23000.0 |
| 6203. C7H16-24+c2h3=ZC7H15+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 6204. C7H16-24+ch3o2=XC7H15+ch3o2h | 1.62E+05 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.90E+05 | 2.0 | 1427.0 |
| 6205. C7H16-24+ch3o2=YC7H15+ch3o2h | 1.50E+04 | 2.5 | 12260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.26E+02 | 2.5 | 1534.0 |
| 6206. C7H16-24+ch3o2=ZC7H15+ch3o2h | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.62E+03 | 2.3 | 2120.0 |
| 6207. C7H16-24+XC7H15O2=XC7H15+XC7H15O2H | 3.36E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6208. C7H16-24+YC7H15O2=XC7H15+YC7H15O2H | 3.36E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6209. C7H16-24+ZC7H15O2=XC7H15+ZC7H15O2H | 3.36E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6210. C7H16-24+XC7H15O2=YC7H15+XC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6211. C7H16-24+YC7H15O2=YC7H15+YC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6212. C7H16-24+ZC7H15O2=YC7H15+ZC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6213. C7H16-24+XC7H15O2=ZC7H15+XC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6214. C7H16-24+YC7H15O2=ZC7H15+YC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6215. C7H16-24+ZC7H15O2=ZC7H15+ZC7H15O2H | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6216. C7H16-24+XC7H15=YC7H15+C7H16-24 | 3.36E+13 | 0.0 | 7900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 12300.0 |
| 6217. C7H16-24+XC7H15=ZC7H15+C7H16-24 | 5.60E+12 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6218. C7H16-24+YC7H15=ZC7H15+C7H16-24 | 5.60E+12 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.30E+11 | 0.0 | 7900.0 |
| 6219. C7H16-24+o2cho=XC7H15+ho2cho | 3.36E+13 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.29E+03 | 2.3 | 3057.0 |
| 6220. C7H16-24+o2cho=YC7H15+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 16010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.78E+00 | 2.8 | 3173.0 |
| 6221. C7H16-24+o2cho=ZC7H15+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.59E+01 | 2.6 | 2829.0 |
| 6222. NC7H15=IC4H8+nc3h7 | 7.64E+22 | -2.6 | 32570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6223. NC7H15=AC6H12+ch3 | 1.25E+21 | -2.2 | 34280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6224. OC7H15=BC6H12+ch3 | 4.96E+20 | -2.0 | 33920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6225. OC7H15=NEOC6H12+ch3 | 2.37E+17 | -1.4 | 32500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 7200.0 |
| 6226. OC7H15=OC7H14+h | 3.33E+13 | -0.1 | 36260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+13 | 0.0 | 2500.0 |
| 6227. PC7H15=nc3h7+ch3+ac3h5 | 2.22E+20 | -2.1 | 32470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 7200.0 |
| 6228. PC7H15=PC7H14+h | 1.53E+13 | 0.1 | 36810.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+13 | 0.0 | 1200.0 |
| 6229. PC7H15=OC7H14+h | 1.28E+13 | -0.1 | 36260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 2500.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6230. QC7H15=c2h4+NEOC5H11 | 4.06E+15 | -0.6 | 29100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.30E+11 | 0.0 | 7200.0 |
| 6231. QC7H15=PC7H14+h | 2.36E+14 | -0.2 | 35600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+13 | 0.0 | 2500.0 |
| 6232. OC7H15+o2=OC7H14+ho2 | 3.00E-29 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6233. PC7H15+o2=OC7H14+ho2 | 3.00E-29 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6234. PC7H15+o2=PC7H14+ho2 | 4.50E-29 | 0.0 | 5020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6235. QC7H15+o2=PC7H14+ho2 | 3.00E-29 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6236. NC7H15=PC7H15 | 2.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.00E+11 | 0.0 | 21100.0 |
| 6237. NC7H15=QC7H15 | 3.00E+11 | 0.0 | 14100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.00E+11 | 0.0 | 14100.0 |
| 6238. NC7H15+ho2=NC7H15O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.34E+15 | -0.6 | 25950.0 |
| 6239. OC7H15+ho2=OC7H15O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.08E+17 | -1.1 | 27860.0 |
| 6240. PC7H15+ho2=PC7H15O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.08E+17 | -1.1 | 27860.0 |
| 6241. QC7H15+ho2=QC7H15O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.34E+15 | -0.6 | 25950.0 |
| 6242. NC7H15+ch3o2=NC7H15O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.09E+14 | -0.3 | 30190.0 |
| 6243. OC7H15+ch3o2=OC7H15O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.93E+16 | -0.8 | 32100.0 |
| 6244. PC7H15+ch3o2=PC7H15O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.93E+16 | -0.8 | 32100.0 |
| 6245. QC7H15+ch3o2=QC7H15O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.09E+14 | -0.3 | 30190.0 |
| 6246. XC7H15=c3h6+IC4H9 | 8.43E+20 | -2.2 | 32420.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 6247. XC7H15=DC6H12+ch3 | 2.01E+19 | -1.8 | 33330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 6248. XC7H15=XC7H14+h | 5.61E+14 | -0.3 | 34450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+13 | 0.0 | 2500.0 |
| 6249. YC7H15=IC4H7+ch3+c2h5 | 2.22E+20 | -2.1 | 32470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6250. YC7H15=XC7H14+h | 1.44E+13 | 0.2 | 37690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+13 | 0.0 | 1200.0 |
| 6251. YC7H15=YC7H14+h | 3.09E+13 | 0.1 | 36390.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+13 | 0.0 | 2500.0 |
| 6252. ZC7H15=CC6H12+ch3 | 2.91E+18 | -1.6 | 33250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 6253. ZC7H15=YC7H14+h | 8.20E+13 | -0.1 | 34370.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+13 | 0.0 | 2500.0 |
| 6254. XC7H15+o2=XC7H14+ho2 | 1.50E-29 | 0.0 | 2000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6255. YC7H15+o2=XC7H14+ho2 | 6.00E-29 | 0.0 | 5020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6256. YC7H15+o2=YC7H14+ho2 | 3.00E-29 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6257. ZC7H15+o2=YC7H14+ho2 | 3.00E-29 | 0.0 | 2000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-29 | 0.0 | 17500.0 |
| 6258. XC7H15=YC7H15 | 3.71E+11 | 0.0 | 23720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.49E+09 | 0.5 | 28260.0 |
| 6259. XC7H15+ho2=XC7H15O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.51E+14 | -0.5 | 26040.0 |
| 6260. YC7H15+ho2=YC7H15O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.41E+18 | -1.3 | 28400.0 |
| 6261. ZC7H15+ho2=ZC7H15O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.78E+17 | -1.2 | 28100.0 |
| 6262. XC7H15+ch3o2=XC7H15O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.32E+13 | -0.2 | 30280.0 |
| 6263. YC7H15+ch3o2=YC7H15O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+17 | -1.0 | 32640.0 |
| 6264. ZC7H15+ch3o2=ZC7H15O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.86E+16 | -0.9 | 32340.0 |
| 6265. PC7H14=TC4H9+ac3h5 | 1.86E+27 | -3.4 | 74280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.22E+14 | -0.8 | -131.0 |
| 6266. OC7H14=CC6H11-B+ch3 | 3.09E+24 | -2.5 | 74100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+14 | -0.3 | -131.0 |
| 6267. OC7H14+oh=c2h5hco+TC4H9 | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6268. OC7H14+oh=NEOC5H11+ch3hco | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6269. PC7H14+oh=NEOC5H11+ch3hco | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6270. PC7H14+oh=ch2o+HC6H13 | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6271. OC7H14+o=TC4H9+hco+c2h4 | 2.00E+10 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6272. PC7H14+o=ch2o+NEOC6H12 | 2.00E+10 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6273. OC7H14+h=OC7H13-N+h2 | 2.00E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.10E+04 | 2.5 | 11120.0 |
| 6274. OC7H14+h=PC7H13-O+h2 | 1.73E+04 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.86E+05 | 2.1 | 20850.0 |
| 6275. OC7H14+oh=OC7H13-N+h2o | 1.58E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+09 | 1.0 | 21100.0 |
| 6276. OC7H14+oh=PC7H13-O+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.80E+08 | 1.6 | 33220.0 |
| 6277. PC7H14+h=PC7H13-N+h2 | 2.00E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.09E+04 | 2.5 | 11120.0 |
| 6278. PC7H14+h=PC7H13-O+h2 | 3.38E+05 | 2.4 | 207.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.35E+06 | 2.1 | 20420.0 |
| 6279. PC7H14+oh=PC7H13-N+h2o | 1.58E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+09 | 1.0 | 21100.0 |
| 6280. PC7H14+oh=PC7H13-O+h2o | 2.76E+04 | 2.6 | -1919.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.54E+06 | 2.4 | 33450.0 |
| 6281. XC7H14=ic3h7+IC4H7 | 2.21E+24 | -2.4 | 74670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.28E+14 | -0.3 | 0.0 |
| 6282. YC7H14=ch3+CC6H11-B | 4.47E+22 | -2.1 | 75430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.93E+14 | -0.3 | 0.0 |
| 6283. XC7H14+oh=ch2o+DC6H13 | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6284. XC7H14+oh=aceton+IC4H9 | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6285. YC7H14+oh=aceton+IC4H9 | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6286. XC7H14+o=ch2o+CC6H12 | 2.00E+10 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6287. YC7H14+o=aceton+IC4H8 | 2.00E+10 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6288. XC7H14+h=XC7H13-X1+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.05E+06 | 1.9 | 20130.0 |
| 6289. XC7H14+h=XC7H13-Z+h2 | 3.38E+05 | 2.4 | 207.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.42E+06 | 2.1 | 20370.0 |
| 6290. XC7H14+h=XC7H13-Y2+h2 | 6.02E+05 | 2.4 | 2583.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.74E+02 | 3.0 | 11180.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6291. XC7H14+h=XC7H13-X2+h2 | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.88E+04 | 2.5 | 11080.0 |
| 6292. XC7H14+oh=XC7H13-X1+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.50E+08 | 1.4 | 32500.0 |
| 6293. XC7H14+oh=XC7H13-Z+h2o | 2.76E+04 | 2.6 | -1919.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.57E+06 | 2.4 | 33400.0 |
| 6294. XC7H14+oh=XC7H13-Y2+h2o | 5.73E+10 | 0.5 | 63.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.95E+08 | 1.1 | 23820.0 |
| 6295. XC7H14+oh=XC7H13-X2+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.36E+09 | 0.9 | 21060.0 |
| 6296. XC7H14+ch3=XC7H13-X1+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.35E+03 | 2.9 | 23800.0 |
| 6297. XC7H14+ch3=XC7H13-Z+ch4 | 3.69E+00 | 3.3 | 4002.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.26E+03 | 3.0 | 24640.0 |
| 6298. XC7H14+ch3=XC7H13-Y2+ch4 | 6.01E-10 | 6.4 | 893.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E-11 | 6.9 | 9973.0 |
| 6299. XC7H14+ch3=XC7H13-X2+ch4 | 9.04E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.22E+00 | 3.6 | 11950.0 |
| 6300. XC7H14+ho2=XC7H13-X1+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.01E+07 | 1.7 | 15240.0 |
| 6301. XC7H14+ho2=XC7H13-Z+h2o2 | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.62E+06 | 2.0 | 14380.0 |
| 6302. XC7H14+ho2=XC7H13-Y2+h2o2 | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.30E+01 | 2.8 | 2824.0 |
| 6303. XC7H14+ho2=XC7H13-X2+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.33E+04 | 2.2 | 4506.0 |
| 6304. XC7H14+ch3o2=XC7H13-X1+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.10E+07 | 1.5 | 12220.0 |
| 6305. XC7H14+ch3o2=XC7H13-Z+ch3o2h | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.38E+06 | 1.8 | 11360.0 |
| 6306. XC7H14+ch3o2=XC7H13-Y2+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.52E+02 | 2.6 | -196.0 |
| 6307. XC7H14+ch3o2=XC7H13-X2+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.32E+05 | 2.0 | 1486.0 |
| 6308. XC7H14+ch3o=XC7H13-X1+ch3oh | 9.00E+01 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.77E+03 | 2.4 | 27900.0 |
| 6309. XC7H14+ch3o=XC7H13-Z+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.52E+02 | 2.7 | 27040.0 |
| 6310. XC7H14+ch3o=XC7H13-Y2+ch3oh | 2.29E+10 | 0.0 | 2873.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.69E+06 | 0.6 | 9743.0 |
| 6311. XC7H14+ch3o=XC7H13-X2+ch3oh | 4.34E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+10 | 0.0 | 9048.0 |
| 6312. YC7H14+h=XC7H13-Z+h2 | 3.46E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.75E+06 | 2.1 | 20050.0 |
| 6313. YC7H14+h=YC7H13-Y2+h2 | 2.65E+06 | 2.2 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.84E+07 | 2.1 | 22290.0 |
| 6314. YC7H14+h=YC7H13-X2+h2 | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.18E+04 | 2.5 | 11080.0 |
| 6315. YC7H14+oh=XC7H13-Z+h2o | 6.24E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.61E+08 | 1.6 | 32420.0 |
| 6316. YC7H14+oh=YC7H13-Y2+h2o | 6.14E+02 | 3.2 | -3500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.84E+04 | 3.1 | 33940.0 |
| 6317. YC7H14+oh=YC7H13-X2+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.12E+09 | 1.0 | 21060.0 |
| 6318. OC7H13-N=IC4H8+sc3h5 | 3.48E+21 | -2.4 | 44670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6319. PC7H13-N=IC4H8+ac3h5 | 4.89E+19 | -2.1 | 19390.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6320. PC7H13-O=PC7H13-N | 4.17E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.01E+08 | 0.2 | 10550.0 |
| 6321. PC7H13-O+ho2=PC7H13O-O+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.72E+15 | -1.1 | 15690.0 |
| 6322. PC7H13-O+ch3o2=PC7H13O-O+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.52E+17 | -1.7 | 20450.0 |
| 6323. PC7H13-O+c2h5o2=PC7H13O-O+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.58E+14 | -0.8 | 18290.0 |
| 6324. PC7H13O-O=acrol+TC4H9 | 4.56E+21 | -2.3 | 7565.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 6325. PC7H13O-O=TC4H9CHO+c2h3 | 8.53E+17 | -1.5 | 24330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 6326. XC7H13-X1=ac3h4+IC4H9 | 8.71E+21 | -2.4 | 59530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6327. XC7H13-Z=ACC6H10+ch3 | 2.84E+16 | -0.8 | 41230.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6328. XC7H13-Z+ho2=XC7H13O-Z+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.41E+14 | -0.7 | 15380.0 |
| 6329. XC7H13-Z+ch3o2=XC7H13O-Z+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.28E+16 | -1.3 | 20140.0 |
| 6330. XC7H13-Z+c2h5o2=XC7H13O-Z+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.46E+13 | -0.4 | 17980.0 |
| 6331. XC7H13-Y2=IC4H8+tc3h5 | 6.32E+18 | -1.8 | 43600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 8800.0 |
| 6332. XC7H13-X2=c3h6+IC4H7 | 2.10E+16 | -1.1 | 17820.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6333. YC7H13-Y2+ho2=YC7H13O-Y2+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.11E+15 | -1.0 | 17000.0 |
| 6334. YC7H13-Y2+ch3o2=YC7H13O-Y2+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.06E+17 | -1.6 | 21760.0 |
| 6335. YC7H13-Y2+c2h5o2=YC7H13O-Y2+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.35E+14 | -0.6 | 19610.0 |
| 6336. YC7H13-X2=c3h6+IC4H7-I1 | 1.23E+18 | -1.4 | 43840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6337. XC7H13O-Z=ic3h7cho+tc3h5 | 7.52E+21 | -2.4 | 30190.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6338. YC7H13O-Y2=aceton+IC4H7-I1 | 1.31E+18 | -1.3 | 29420.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6339. NC7H15O2=NC7H15+o2 | 1.48E+20 | -1.7 | 35790.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6340. OC7H15O2=OC7H15+o2 | 2.76E+22 | -2.4 | 38110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6341. PC7H15O2=PC7H15+o2 | 2.76E+22 | -2.4 | 38110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6342. QC7H15O2=QC7H15+o2 | 5.41E+20 | -1.7 | 35790.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6343. NC7H15+NC7H15O2=NC7H15O+NC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.74E+13 | -0.2 | 29430.0 |
| 6344. NC7H15+OC7H15O2=NC7H15O+OC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.88E+13 | -0.1 | 29030.0 |
| 6345. NC7H15+PC7H15O2=NC7H15O+PC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.88E+13 | -0.1 | 29030.0 |
| 6346. NC7H15+QC7H15O2=NC7H15O+QC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.74E+13 | -0.2 | 29430.0 |
| 6347. OC7H15+NC7H15O2=OC7H15O+NC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.99E+15 | -0.8 | 31350.0 |
| 6348. OC7H15+OC7H15O2=OC7H15O+OC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.50E+15 | -0.7 | 30950.0 |
| 6349. OC7H15+PC7H15O2=OC7H15O+PC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.50E+15 | -0.7 | 30950.0 |
| 6350. OC7H15+QC7H15O2=OC7H15O+QC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.99E+15 | -0.8 | 31350.0 |
| 6351. PC7H15+NC7H15O2=PC7H15O+NC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.99E+15 | -0.8 | 31350.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6352. PC7H15+OC7H15O2=PC7H15O+OC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.50E+15 | -0.7 | 30950.0 |
| 6353. PC7H15+PC7H15O2=PC7H15O+PC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.50E+15 | -0.7 | 30950.0 |
| 6354. PC7H15+QC7H15O2=PC7H15O+QC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.99E+15 | -0.8 | 31350.0 |
| 6355. QC7H15+NC7H15O2=QC7H15O+NC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.74E+13 | -0.2 | 29430.0 |
| 6356. QC7H15+OC7H15O2=QC7H15O+OC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.87E+13 | -0.1 | 29030.0 |
| 6357. QC7H15+PC7H15O2=QC7H15O+PC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.87E+13 | -0.1 | 29030.0 |
| 6358. QC7H15+QC7H15O2=QC7H15O+QC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.74E+13 | -0.2 | 29430.0 |
| 6359. NC7H15O2+ho2=NC7H15O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.74E+13 | -0.8 | 33610.0 |
| 6360. OC7H15O2+ho2=OC7H15O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.53E+13 | -0.8 | 33640.0 |
| 6361. PC7H15O2+ho2=PC7H15O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.53E+13 | -0.8 | 33640.0 |
| 6362. QC7H15O2+ho2=QC7H15O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.74E+13 | -0.8 | 33610.0 |
| 6363. NC7H15O2+h2o2=NC7H15O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 6364. OC7H15O2+h2o2=OC7H15O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 6365. PC7H15O2+h2o2=PC7H15O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 6366. QC7H15O2+h2o2=QC7H15O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 6367. NC7H15O2+ch3o2=NC7H15O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6368. OC7H15O2+ch3o2=OC7H15O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6369. PC7H15O2+ch3o2=PC7H15O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6370. QC7H15O2+ch3o2=QC7H15O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6371. NC7H15O2+NC7H15O2=o2+NC7H15O+NC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6372. NC7H15O2+OC7H15O2=o2+NC7H15O+OC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6373. NC7H15O2+PC7H15O2=o2+NC7H15O+PC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6374. NC7H15O2+QC7H15O2=o2+NC7H15O+QC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6375. OC7H15O2+OC7H15O2=o2+OC7H15O+OC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6376. OC7H15O2+PC7H15O2=o2+OC7H15O+PC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6377. OC7H15O2+QC7H15O2=o2+OC7H15O+QC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6378. PC7H15O2+PC7H15O2=o2+PC7H15O+PC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6379. PC7H15O2+QC7H15O2=o2+PC7H15O+QC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6380. QC7H15O2+QC7H15O2=o2+QC7H15O+QC7H15O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6381. OC7H15O2=OC7H14+ho2 | 5.04E+38 | -8.1 | 40490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.74E+28 | -5.7 | 17490.0 |
| 6382. PC7H15O2=OC7H14+ho2 | 5.04E+38 | -8.1 | 40490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.74E+28 | -5.7 | 17490.0 |
| 6383. PC7H15O2=PC7H14+ho2 | 5.07E+42 | -9.4 | 41490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.20E+32 | -7.2 | 16640.0 |
| 6384. QC7H15O2=PC7H14+ho2 | 5.04E+38 | -8.1 | 40490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.71E+29 | -6.2 | 20470.0 |
| 6385. NC7H15O2=NC7H14OOH-N2 | 7.50E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.83E+11 | -0.5 | 8940.0 |
| 6386. NC7H15O2=NC7H14OOH-O | 2.50E+10 | 0.0 | 20850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.34E+09 | -0.1 | 7830.0 |
| 6387. NC7H15O2=NC7H14OOH-P | 3.12E+09 | 0.0 | 19050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.92E+08 | -0.1 | 6030.0 |
| 6388. NC7H15O2=NC7H14OOH-Q | 5.86E+08 | 0.0 | 25550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.43E+09 | -0.5 | 10090.0 |
| 6389. OC7H15O2=OC7H14OOH-N | 1.12E+11 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.05E+11 | -0.5 | 8960.0 |
| 6390. OC7H15O2=OC7H14OOH-P | 2.00E+11 | 0.0 | 26850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.46E+10 | -0.1 | 13800.0 |
| 6391. OC7H15O2=OC7H14OOH-Q | 3.75E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.05E+11 | -0.5 | 8960.0 |
| 6392. PC7H15O2=PC7H14OOH-N | 1.41E+10 | 0.0 | 22350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.31E+10 | -0.5 | 6910.0 |
| 6393. PC7H15O2=PC7H14OOH-O | 2.00E+11 | 0.0 | 26850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.46E+10 | -0.1 | 13800.0 |
| 6394. PC7H15O2=PC7H14OOH-Q | 3.00E+11 | 0.0 | 29400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.37E+11 | -0.5 | 13960.0 |
| 6395. QC7H15O2=QC7H14OOH-N | 1.76E+09 | 0.0 | 25550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.43E+09 | -0.5 | 10090.0 |
| 6396. QC7H15O2=QC7H14OOH-O | 2.50E+10 | 0.0 | 20850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.33E+09 | -0.1 | 7830.0 |
| 6397. QC7H15O2=QC7H14OOH-P | 2.00E+11 | 0.0 | 26850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.87E+10 | -0.1 | 13830.0 |
| 6398. XC7H15O2=XC7H15+o2 | 1.25E+20 | -1.6 | 35670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6399. YC7H15O2=YC7H15+o2 | 3.41E+23 | -2.5 | 37210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6400. ZC7H15O2=ZC7H15+o2 | 2.97E+22 | -2.2 | 37940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6401. XC7H15+XC7H15O2=XC7H15O+XC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.74E+13 | -0.1 | 29750.0 |
| 6402. XC7H15+YC7H15O2=XC7H15O+YC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.89E+13 | -0.1 | 30560.0 |
| 6403. XC7H15+ZC7H15O2=XC7H15O+ZC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.24E+13 | -0.2 | 29540.0 |
| 6404. YC7H15+XC7H15O2=YC7H15O+XC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.78E+16 | -1.0 | 32100.0 |
| 6405. YC7H15+YC7H15O2=YC7H15O+YC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.36E+16 | -1.0 | 32910.0 |
| 6406. YC7H15+ZC7H15O2=YC7H15O+ZC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.49E+17 | -1.1 | 31890.0 |
| 6407. ZC7H15+XC7H15O2=ZC7H15O+XC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.51E+16 | -0.8 | 31810.0 |
| 6408. ZC7H15+YC7H15O2=ZC7H15O+YC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.73E+16 | -0.8 | 32620.0 |
| 6409. ZC7H15+ZC7H15O2=ZC7H15O+ZC7H15O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.79E+16 | -0.9 | 31600.0 |
| 6410. XC7H15O2+ho2=XC7H15O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.74E+13 | -0.8 | 33610.0 |
| 6411. YC7H15O2+ho2=YC7H15O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.78E+13 | -0.8 | 33610.0 |
| 6412. ZC7H15O2+ho2=ZC7H15O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.89E+13 | -0.8 | 33630.0 |

```
6413. XC7H15O2+h2o2=XC7H15O2H+ho2                2.40E+12   0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.40E+12   0.0    10000.0
6414. YC7H15O2+h2o2=YC7H15O2H+ho2                2.40E+12   0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.40E+12   0.0    10000.0
6415. ZC7H15O2+h2o2=ZC7H15O2H+ho2                2.40E+12   0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.40E+12   0.0    10000.0
6416. XC7H15O2+ch3o2=XC7H15O+ch3o+o2             1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6417. YC7H15O2+ch3o2=YC7H15O+ch3o+o2             1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6418. ZC7H15O2+ch3o2=ZC7H15O+ch3o+o2             1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6419. XC7H15O2+XC7H15O2=o2+XC7H15O+XC7H15O       1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6420. XC7H15O2+YC7H15O2=XC7H15O+YC7H15O+o2       1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6421. XC7H15O2+ZC7H15O2=XC7H15O+ZC7H15O+o2       1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6422. YC7H15O2+YC7H15O2=o2+YC7H15O+YC7H15O       1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6423. YC7H15O2+ZC7H15O2=YC7H15O+ZC7H15O+o2       1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6424. ZC7H15O2+ZC7H15O2=o2+ZC7H15O+ZC7H15O       1.40E+16  -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6425. XC7H15O2=XC7H14OOH-X1                      3.75E+10   0.0    24400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            9.13E+10  -0.5     8940.0
6426. XC7H15O2=XC7H14OOH-Y1                      1.00E+11   0.0    24100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.06E+09   0.1    12930.0
6427. XC7H15O2=XC7H14OOH-Z                       2.50E+10   0.0    20850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.94E+09  -0.1     7860.0
6428. XC7H15O2=XC7H14OOH-Y2                      1.56E+09   0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.22E+07   0.1     5880.0
6429. XC7H15O2=XC7H14OOH-X2                      1.17E+09   0.0    25550.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.86E+09  -0.5    10090.0
6430. YC7H15O2=YC7H14OOH-X1                      6.00E+11   0.0    29400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.46E+12  -0.5    13940.0
6431. YC7H15O2=YC7H14OOH-Z                       2.00E+11   0.0    26850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.11E+10  -0.1    13840.0
6432. YC7H15O2=YC7H14OOH-Y2                      1.25E+10   0.0    19100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.79E+08   0.1     7940.0
6433. YC7H15O2=YC7H14OOH-X2                      9.38E+09   0.0    22350.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.28E+10  -0.5     6890.0
6434. ZC7H15O2=ZC7H14OOH-X                       1.50E+11   0.0    24400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.10E+11  -0.6     8970.0
6435. ZC7H15O2=ZC7H14OOH-Y                       2.00E+11   0.0    24100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.11E+09   0.0    12990.0
6436. XC7H15O2=XC7H14+ho2                        4.53E+35  -7.2    39490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.59E+27  -5.4    20740.0
6437. YC7H15O2=XC7H14+ho2                        1.01E+43  -9.4    41490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.39E+32  -7.3    16660.0
6438. YC7H15O2=YC7H14+ho2                        5.04E+38  -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.82E+27  -5.8    18260.0
6439. ZC7H15O2=YC7H14+ho2                        9.06E+35  -7.2    39490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.56E+25  -4.9    18550.0
6440. NC7H15O2H=NC7H15O+oh                       1.00E+16   0.0    39000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.86E+07   1.9    -6732.0
6441. OC7H15O2H=OC7H15O+oh                       1.00E+16   0.0    39000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.71E+06   2.1    -7162.0
6442. PC7H15O2H=PC7H15O+oh                       1.00E+16   0.0    39000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.71E+06   2.1    -7162.0
6443. QC7H15O2H=QC7H15O+oh                       1.00E+16   0.0    39000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.86E+07   1.9    -6732.0
6444. XC7H15O2H=XC7H15O+oh                       1.00E+16   0.0    39000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.06E+07   1.9    -6512.0
6445. YC7H15O2H=YC7H15O+oh                       1.00E+16   0.0    39000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.40E+07   1.9    -5702.0
6446. ZC7H15O2H=ZC7H15O+oh                       1.00E+16   0.0    39000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.02E+07   1.9    -6742.0
6447. NC7H15O=ch2o+BC6H13                        5.31E+24  -3.3    23120.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+10   0.0    11900.0
6448. OC7H15O=c2h5hco+TC4H9                      6.38E+21  -2.2    18140.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.25E+10   0.0    12900.0
6449. OC7H15O=c2h5+TC4H9CHO                      9.79E+21  -2.5    22720.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.50E+10   0.0    12900.0
6450. PC7H15O=ch3hco+NEOC5H11                    7.50E+17  -1.3    18870.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+10   0.0    12900.0
6451. QC7H15O=ch2o+HC6H13                        5.86E+20  -2.3    24560.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+10   0.0    11900.0
6452. XC7H15O=DC6H13+ch2o                        3.97E+22  -2.6    24500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11   0.0    11900.0
6453. YC7H15O=IC4H9+aceton                       8.19E+23  -2.9    18020.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11   0.0    11900.0
6454. ZC7H15O=ic3h7+ic3h7cho                     2.63E+24  -3.0    21010.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11   0.0    11900.0
6455. NC7H14OOH-N2=N-NC7H14O+oh                  7.50E+10   0.0    15250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6456. NC7H14OOH-O=N-OC7H14O+oh                   7.50E+10   0.0    15250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6457. NC7H14OOH-P=N-PC7H14O+oh                   9.38E+09   0.0     7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6458. NC7H14OOH-Q=N-QC7H14O+oh                   1.17E+09   0.0     1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6459. OC7H14OOH-N=N-OC7H14O+oh                   7.50E+10   0.0    15250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6460. OC7H14OOH-P=O-PC7H14O+oh                   6.00E+11   0.0    22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6461. OC7H14OOH-Q=O-QC7H14O+oh                   7.50E+10   0.0    15250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6462. PC7H14OOH-N=N-PC7H14O+oh                   9.38E+09   0.0     6000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6463. PC7H14OOH-O=O-PC7H14O+oh                   6.00E+11   0.0    22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6464. PC7H14OOH-Q=P-QC7H14O+oh                   6.00E+11   0.0    22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6465. QC7H14OOH-N=N-QC7H14O+oh                   1.17E+09   0.0     1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6466. QC7H14OOH-O=O-QC7H14O+oh                   7.50E+10   0.0    15250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6467. QC7H14OOH-P=P-QC7H14O+oh                   6.00E+11   0.0    22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6468. OC7H14OOH-P=OC7H14+ho2                     1.23E+20  -2.5    23350.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.25E+11   0.0    13400.0
6469. PC7H14OOH-O=OC7H14+ho2                     1.23E+20  -2.5    23350.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.25E+11   0.0    13400.0
6470. PC7H14OOH-Q=PC7H14+ho2                     7.52E+21  -2.7    22770.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.36E+11   0.0    13360.0
6471. QC7H14OOH-P=PC7H14+ho2                     2.11E+19  -2.0    20360.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.36E+11   0.0    13360.0
6472. NC7H14OOH-N2=oh+ch2o+AC6H12                5.00E+13   0.0    25500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
6473. NC7H14OOH-O=oh+ch2o+BC6H12                 5.00E+13   0.0    25500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00   0.0        0.0
```

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6474. OC7H14OOH-N=oh+c2h5hco+IC4H8 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6475. OC7H14OOH-Q=oh+TC4H9CHO+c2h4 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6476. QC7H14OOH-O=oh+ch2o+NEOC6H12 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6477. XC7H14OOH-X1=X-X1C7H14O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6478. XC7H14OOH-Y1=X-Y1C7H14O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6479. XC7H14OOH-Z=X-ZC7H14O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6480. XC7H14OOH-Y2=X-Y2C7H14O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6481. XC7H14OOH-X2=X-X2C7H14O+oh | 1.17E+09 | 0.0 | 1800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6482. YC7H14OOH-X1=X-Y1C7H14O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6483. YC7H14OOH-Z=Y-ZC7H14O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6484. YC7H14OOH-Y2=Y-YC7H14O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6485. YC7H14OOH-X2=X-Y2C7H14O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6486. ZC7H14OOH-X=X-ZC7H14O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6487. ZC7H14OOH-Y=Y-ZC7H14O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6488. XC7H14OOH-Y1=XC7H14+ho2 | 3.38E+18 | -1.8 | 19480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.75E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6489. YC7H14OOH-X1=XC7H14+ho2 | 4.19E+22 | -2.6 | 21270.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.75E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6490. YC7H14OOH-Z=YC7H14+ho2 | 9.83E+20 | -2.4 | 18730.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+11 | 0.0 | 9512.0 |
| 6491. ZC7H14OOH-Y=YC7H14+ho2 | 1.16E+20 | -2.3 | 19340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+11 | 0.0 | 9512.0 |
| 6492. XC7H14OOH-X1=oh+ch2o+DC6H12 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6493. XC7H14OOH-Z=oh+ch2o+CC6H12 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6494. YC7H14OOH-Y2=oh+aceton+IC4H8 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6495. ZC7H14OOH-X=oh+ic3h7cho+c3h6 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6496. NC7H14OOH-N2O2=NC7H14OOH-N2+o2 | 9.20E+19 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6497. NC7H14OOH-OO2=NC7H14OOH-O+o2 | 2.80E+22 | -2.3 | 38060.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6498. NC7H14OOH-PO2=NC7H14OOH-P+o2 | 2.80E+22 | -2.3 | 38060.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6499. NC7H14OOH-QO2=NC7H14OOH-Q+o2 | 3.35E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6500. OC7H14OOH-NO2=OC7H14OOH-N+o2 | 5.58E+19 | -1.6 | 35650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6501. OC7H14OOH-PO2=OC7H14OOH-P+o2 | 2.10E+22 | -2.3 | 38020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6502. OC7H14OOH-QO2=OC7H14OOH-Q+o2 | 2.03E+20 | -1.6 | 35700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6503. PC7H14OOH-NO2=PC7H14OOH-N+o2 | 5.58E+19 | -1.6 | 35650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6504. PC7H14OOH-OO2=PC7H14OOH-O+o2 | 2.10E+22 | -2.3 | 38020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6505. PC7H14OOH-QO2=PC7H14OOH-Q+o2 | 2.03E+20 | -1.6 | 35650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6506. QC7H14OOH-NO2=QC7H14OOH-N+o2 | 3.35E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6507. QC7H14OOH-OO2=QC7H14OOH-O+o2 | 2.80E+22 | -2.3 | 38060.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6508. QC7H14OOH-PO2=QC7H14OOH-P+o2 | 2.80E+22 | -2.3 | 38060.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6509. NC7H14OOH-N2O2=NEOC7KETNN+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.84E+02 | 1.5 | 43730.0 |
| 6510. NC7H14OOH-OO2=NEOC7KETNO+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.23E+03 | 1.4 | 43790.0 |
| 6511. NC7H14OOH-PO2=NEOC7KETNP+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.04E+02 | 1.4 | 41740.0 |
| 6512. NC7H14OOH-QO2=NEOC7KETNQ+oh | 3.91E+08 | 0.0 | 22550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.06E+01 | 1.5 | 44880.0 |
| 6513. OC7H14OOH-NO2=NEOC7KETON+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.35E+01 | 1.8 | 43170.0 |
| 6514. OC7H14OOH-PO2=NEOC7KETOP+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.76E+03 | 1.6 | 48370.0 |
| 6515. OC7H14OOH-QO2=NEOC7KETOQ+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.36E+01 | 1.8 | 43170.0 |
| 6516. PC7H14OOH-NO2=NEOC7KETPN+oh | 1.56E+09 | 0.0 | 16050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.38E+00 | 1.9 | 42230.0 |
| 6517. PC7H14OOH-OO2=NEOC7KETPO+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.80E+03 | 1.7 | 49170.0 |
| 6518. PC7H14OOH-QO2=NEOC7KETPQ+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.47E+02 | 1.9 | 50030.0 |
| 6519. QC7H14OOH-NO2=NEOC7KETQN+oh | 3.91E+08 | 0.0 | 22550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+01 | 1.5 | 45870.0 |
| 6520. QC7H14OOH-OO2=NEOC7KETQO+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.34E+02 | 1.6 | 44680.0 |
| 6521. QC7H14OOH-PO2=NEOC7KETQP+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.37E+04 | 1.4 | 48900.0 |
| 6522. XC7H14OOH-X1O2=XC7H14OOH-X1+o2 | 1.66E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6523. XC7H14OOH-Y1O2=XC7H14OOH-Y1+o2 | 1.32E+24 | -2.5 | 37500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6524. XC7H14OOH-ZO2=XC7H14OOH-Z+o2 | 2.58E+22 | -2.3 | 38020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6525. XC7H14OOH-Y2O2=XC7H14OOH-Y2+o2 | 1.32E+24 | -2.5 | 37500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6526. XC7H14OOH-X2O2=XC7H14OOH-X2+o2 | 1.66E+20 | -1.6 | 35720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6527. YC7H14OOH-X1O2=YC7H14OOH-X1+o2 | 1.61E+20 | -1.6 | 35710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6528. YC7H14OOH-ZO2=YC7H14OOH-Z+o2 | 2.56E+22 | -2.3 | 38020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6529. YC7H14OOH-Y2O2=YC7H14OOH-Y2+o2 | 1.20E+24 | -2.5 | 37480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6530. YC7H14OOH-X2O2=YC7H14OOH-X2+o2 | 1.61E+20 | -1.6 | 35710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6531. ZC7H14OOH-XO2=ZC7H14OOH-X+o2 | 5.52E+19 | -1.6 | 35670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6532. ZC7H14OOH-YO2=ZC7H14OOH-Y+o2 | 2.89E+23 | -2.4 | 37410.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6533. XC7H14OOH-X1O2=C7KET24XX1+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.83E+03 | 1.5 | 44420.0 |
| 6534. XC7H14OOH-Y1O2=C7KET24XY1+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.32E+04 | 1.3 | 48720.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6535. XC7H14OOH-ZO2=C7KET24XZ+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.98E+03 | 1.4 | 44470.0 |
| 6536. XC7H14OOH-Y2O2=C7KET24XY2+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.67E+02 | 1.4 | 42380.0 |
| 6537. XC7H14OOH-X2O2=C7KET24XX2+oh | 3.91E+08 | 0.0 | 22550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.01E+01 | 1.5 | 45570.0 |
| 6538. ZC7H14OOH-XO2=C7KET24ZX+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.17E+02 | 1.7 | 43610.0 |
| 6539. ZC7H14OOH-YO2=C7KET24ZY+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.32E+04 | 1.5 | 49000.0 |
| 6540. NEOC7KETNN=ch2o+C5H10CHO2-2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6541. NEOC7KETNO=c2h5hco+tc3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6542. NEOC7KETNP=ch3hco+TC4H8CHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6543. NEOC7KETNQ=ch2o+IC5H10CHO-BD+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6544. NEOC7KETON=ch2o+TC3H6COC2H5+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6545. NEOC7KETOP=ch3hco+TC4H9CO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6546. NEOC7KETOQ=ch2o+TC4H9COCH2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6547. NEOC7KETPN=ch2o+TC3H6CH2COCH3+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6548. NEOC7KETPO=TC4H9CHO+ch3co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6549. NEOC7KETPQ=ch2o+NEOC5H11CO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6550. NEOC7KETQN=ch2o+BC5H10CHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6551. NEOC7KETQO=TC4H9CHO+ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6552. NEOC7KETQP=NEOC5H11CHO+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6553. C7KET24XX1=ch2o+DC5H10CHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6554. C7KET24XY1=IC4H9COCH3+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6555. C7KET24XZ=ic3h7cho+CH3CHCHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6556. C7KET24XY2=aceton+ic3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6557. C7KET24XX2=ch2o+C5H10CHO5-2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6558. C7KET24ZX=ch2o+IC3H7COC2H4S+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6559. C7KET24ZY=aceton+ic3h7co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6560. N-NC7H14O+oh=AC6H12+hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6561. N-OC7H14O+oh=BC6H12+hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6562. N-PC7H14O+oh=c3h6+tc3h6cho+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6563. N-QC7H14O+oh=c2h4+TC4H8CHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6564. O-PC7H14O+oh=ch3chco+TC4H9+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6565. O-QC7H14O+oh=NEOC6H12+hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6566. P-QC7H14O+oh=acrol+TC4H9+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6567. N-NC7H14O+oh=AC6H11-C+ch2o+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6568. N-OC7H14O+oh=IC4H8+c2h5co+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6569. N-PC7H14O+oh=IC4H8+ch2coch3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6570. N-QC7H14O+oh=IC4H8+ch2ch2hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6571. O-PC7H14O+oh=TC4H9CO+c2h4+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6572. O-QC7H14O+oh=c2h4+TC4H9CO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6573. P-QC7H14O+oh=ch2co+NEOC5H11+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6574. N-NC7H14O+ho2=AC6H12+hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6575. N-OC7H14O+ho2=BC6H12+hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6576. N-PC7H14O+ho2=c3h6+tc3h6cho+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6577. N-QC7H14O+ho2=c2h4+TC4H8CHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6578. O-PC7H14O+ho2=ch3chco+TC4H9+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6579. O-QC7H14O+ho2=NEOC6H12+hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6580. P-QC7H14O+ho2=acrol+TC4H9+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6581. N-NC7H14O+ho2=AC6H11-C+ch2o+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6582. N-OC7H14O+ho2=IC4H8+c2h5co+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6583. N-PC7H14O+ho2=IC4H8+ch2coch3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6584. N-QC7H14O+ho2=IC4H8+ch2ch2hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6585. O-PC7H14O+ho2=TC4H9CO+c2h4+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6586. O-QC7H14O+ho2=c2h4+TC4H9CO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6587. P-QC7H14O+ho2=ch2co+NEOC5H11+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6588. X-X1C7H14O+oh=DC6H12+hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6589. X-Y1C7H14O+oh=ic3h5cho+ic3h7+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6590. X-ZC7H14O+oh=CC6H12+hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6591. X-Y2C7H14O+oh=IC4H8+CH3CHCHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6592. X-X2C7H14O+oh=c3h6+ic3h6cho+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6593. Y-YC7H14O+oh=aceton+IC4H7+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6594. Y-ZC7H14O+oh=ic3h5cho+ic3h7+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6595. X-X1C7H14O+oh=ch2o+DC6H11-C+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6596. X-Y1C7H14O+oh=IC4H8+ch2coch3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6597. X-ZC7H14O+oh=c3h6+ic3h7co+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6598. X-Y2C7H14O+oh=aceton+IC4H7+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6599. X-X2C7H14O+oh=ch2o+AC6H11-D+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6600. Y-YC7H14O+oh=aceton+IC4H7-I1+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6601. Y-ZC7H14O+oh=ic3h6co+ic3h7+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6602. X-X1C7H14O+ho2=DC6H12+hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6603. X-Y1C7H14O+ho2=ic3h5cho+ic3h7+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6604. X-ZC7H14O+ho2=CC6H12+hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6605. X-Y2C7H14O+ho2=IC4H8+CH3CHCHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6606. X-X2C7H14O+ho2=c3h6+ic3h6cho+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6607. Y-YC7H14O+ho2=aceton+IC4H7+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6608. Y-ZC7H14O+ho2=ic3h5cho+ic3h7+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6609. X-X1C7H14O+ho2=ch2o+DC6H11-C+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6610. X-Y1C7H14O+ho2=IC4H8+ch2coch3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6611. X-ZC7H14O+ho2=c3h6+ic3h7co+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6612. X-Y2C7H14O+ho2=aceton+IC4H7+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6613. X-X2C7H14O+ho2=ch2o+AC6H11-D+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6614. Y-YC7H14O+ho2=aceton+IC4H7-I1+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6615. Y-ZC7H14O+ho2=ic3h6co+ic3h7+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6616. XC7H14OH=XC7H14+oh | 6.82E+13 | -0.3 | 28150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6617. XO2C7H14OH=XC7H14OH+o2 | 2.26E+22 | -2.2 | 37130.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6618. XO2C7H14OH=IC4H9COCH3+ch2o+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6619. YC7H14OH=YC7H14+oh | 1.91E+16 | -0.9 | 30050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6620. YO2C7H14OH=YC7H14OH+o2 | 4.84E+21 | -2.1 | 37100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6621. YO2C7H14OH=ic3h7cho+aceton+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6622. OC7H14OH=OC7H14+oh | 1.07E+16 | -1.0 | 30210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6623. OO2C7H14OH=OC7H14OH+o2 | 5.89E+21 | -2.1 | 37890.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6624. OO2C7H14OH=TC4H9CHO+ch3hco+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6625. PC7H14OH=PC7H14+oh | 6.11E+14 | -0.5 | 27630.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 6626. PO2C7H14OH=PC7H14OH+o2 | 2.42E+21 | -2.0 | 37800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6627. PO2C7H14OH=NEOC5H11CHO+ch2o+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6628. IC6H13CHO-B+oh=IC6H13CO-B+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.57E+12 | 0.0 | 30950.0 |
| 6629. IC6H13CHO-B+oh=AC6H12CHO-B+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.17E+07 | 1.5 | 28210.0 |
| 6630. IC6H13CHO-B+oh=CC6H12CHO-B+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.90E+05 | 2.0 | 21860.0 |
| 6631. IC6H13CHO-B+oh=DC6H12CHO-B+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.90E+05 | 2.0 | 21860.0 |
| 6632. IC6H13CHO-B+oh=EC6H12CHO-B+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.09E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 6633. IC6H13CHO-B+ho2=IC6H13CO-B+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.53E+12 | -0.4 | 12020.0 |
| 6634. IC6H13CHO-B+ho2=AC6H12CHO-B+h2o2 | 5.52E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.80E+04 | 2.2 | 4452.0 |
| 6635. IC6H13CHO-B+ho2=CC6H12CHO-B+h2o2 | 2.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.54E+03 | 2.6 | 4342.0 |
| 6636. IC6H13CHO-B+ho2=DC6H12CHO-B+h2o2 | 2.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.54E+03 | 2.6 | 4342.0 |
| 6637. IC6H13CHO-B+ho2=EC6H12CHO-B+h2o2 | 2.76E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.40E+04 | 2.2 | 4452.0 |
| 6638. IC6H13CHO-B+ch3o2=IC6H13CO-B+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.86E+13 | -0.5 | 11300.0 |
| 6639. IC6H13CHO-B+ch3o2=AC6H12CHO-B+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.41E+05 | 2.0 | 3746.0 |
| 6640. IC6H13CHO-B+ch3o2=CC6H12CHO-B+ch3o2h | 1.77E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.54E+11 | -0.1 | 6764.0 |
| 6641. IC6H13CHO-B+ch3o2=DC6H12CHO-B+ch3o2h | 1.77E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.54E+11 | -0.1 | 6764.0 |
| 6642. IC6H13CHO-B+ch3o2=EC6H12CHO-B+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.05E+13 | -0.5 | 6627.0 |
| 6643. IC6H13CHO-D+oh=IC6H13CO-D+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.18E+12 | 0.0 | 30920.0 |
| 6644. IC6H13CHO-D+oh=AC6H12CHO-D+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.14E+07 | 1.5 | 28210.0 |
| 6645. IC6H13CHO-D+oh=BC6H12CHO-D+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.98E+09 | 0.6 | 23140.0 |
| 6646. IC6H13CHO-D+oh=CC6H12CHO-D+h2o | 3.62E+07 | 1.6 | -247.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.54E+05 | 2.1 | 21590.0 |
| 6647. IC6H13CHO-D+oh=DC6H12CHO-D+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.09E+13 | -0.2 | 29910.0 |
| 6648. IC6H13CHO-D+oh=EC6H12CHO-D+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 6649. IC6H13CHO-D+ho2=IC6H13CO-D+h2o2 | 3.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.15E+13 | -0.3 | 12000.0 |
| 6650. IC6H13CHO-D+ho2=AC6H12CHO-D+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.80E+04 | 2.2 | 4466.0 |
| 6651. IC6H13CHO-D+ho2=BC6H12CHO-D+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.69E+09 | 0.2 | 4382.0 |
| 6652. IC6H13CHO-D+ho2=CC6H12CHO-D+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.34E+11 | 0.1 | 8072.0 |
| 6653. IC6H13CHO-D+ho2=DC6H12CHO-D+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.08E+12 | -0.5 | 11150.0 |
| 6654. IC6H13CHO-D+ho2=EC6H12CHO-D+h2o2 | 2.76E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.36E+04 | 2.2 | 4452.0 |
| 6655. IC6H13CHO-D+ch3o2=IC6H13CO-D+ch3o2h | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.42E+13 | -0.5 | 12950.0 |
| 6656. IC6H13CHO-D+ch3o2=AC6H12CHO-D+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.38E+05 | 2.0 | 3746.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6657. IC6H13CHO-D+ch3o2=BC6H12CHO-D+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.13E+02 | 2.6 | 2274.0 |
| 6658. IC6H13CHO-D+ch3o2=CC6H12CHO-D+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E+03 | 2.5 | 3562.0 |
| 6659. IC6H13CHO-D+ch3o2=DC6H12CHO-D+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 10030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.70E+05 | 1.9 | 8544.0 |
| 6660. IC6H13CHO-D+ch3o2=EC6H12CHO-D+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.02E+13 | -0.5 | 6627.0 |
| 6661. IC6H13CO-B=BC6H13+co | 1.16E+21 | -2.3 | 11000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 6662. IC6H13CO-B=ic3h6co+nc3h7 | 5.08E+20 | -1.9 | 38720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6663. IC6H13CO-D=DC6H13+co | 3.73E+18 | -1.6 | 12840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 6664. IC6H13CO-D=ch3chco+IC4H9 | 3.83E+19 | -1.6 | 39740.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6665. AC6H12CHO-B=AC6H12+hco | 9.36E+18 | -1.7 | 19830.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 6666. AC6H12CHO-B=ic3h5cho+nc3h7 | 4.48E+19 | -1.8 | 27120.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6667. CC6H12CHO-B=BC6H12+hco | 6.47E+17 | -1.5 | 25210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6668. DC6H12CHO-B=c3h6+tc3h6cho | 2.73E+17 | -1.4 | 21020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 6669. EC6H12CHO-B=c2h4+TC4H8CHO | 5.06E+18 | -1.6 | 30410.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 6670. AC6H12CHO-D=c3h6+ic3h6cho | 8.43E+18 | -1.6 | 32600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6671. BC6H12CHO-D=IC4H8+CH3CHCHO | 1.97E+17 | -1.5 | 23960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 6672. CC6H12CHO-D=CC6H12+hco | 2.81E+15 | -0.9 | 26460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6673. DC6H12CHO-D=ic3h5cho+ic3h7 | 7.83E+15 | -0.6 | 31510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 6674. EC6H12CHO-D=DC6H12+hco | 3.84E+16 | -1.2 | 26660.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6675. NEOC6H13CHO+oh=NEOC6H13CO+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 30940.0 |
| 6676. NEOC6H13CHO+oh=GC6H12CHO+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+06 | 1.9 | 21990.0 |
| 6677. NEOC6H13CHO+oh=HC6H12CHO+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.17E+09 | 1.3 | 28870.0 |
| 6678. NEOC6H13CHO+oh=FC6H12CHO+h2o | 1.29E+10 | 1.1 | 1810.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.53E+09 | 1.1 | 21250.0 |
| 6679. NEOC6H13CHO+ho2=NEOC6H13CO+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+13 | -0.3 | 13690.0 |
| 6680. NEOC6H13CHO+ho2=GC6H12CHO+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+03 | 2.5 | 4472.0 |
| 6681. NEOC6H13CHO+ho2=HC6H12CHO+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E+13 | -0.6 | 9362.0 |
| 6682. NEOC6H13CHO+ho2=FC6H12CHO+h2o2 | 1.68E+13 | 0.0 | 19400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.96E+13 | -0.3 | 7372.0 |
| 6683. NEOC6H13CHO+ch3o2=NEOC6H13CO+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.74E+13 | -0.5 | 8872.0 |
| 6684. NEOC6H13CHO+ch3o2=GC6H12CHO+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+12 | -0.3 | 6894.0 |
| 6685. NEOC6H13CHO+ch3o2=HC6H12CHO+ch3o2h | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.90E+13 | -0.8 | 8642.0 |
| 6686. NEOC6H13CHO+ch3o2=FC6H12CHO+ch3o2h | 1.68E+13 | 0.0 | 19400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.04E+13 | -0.5 | 6652.0 |
| 6687. NEOC6H13CO=HC6H13+co | 1.82E+16 | -1.2 | 13370.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 6688. NEOC6H13CO=NEOC5H11+ch2co | 2.04E+17 | -1.2 | 37200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 6689. GC6H12CHO=NEOC6H12+hco | 3.45E+14 | -0.8 | 25460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 6690. HC6H12CHO=acrol+TC4H9 | 6.88E+19 | -1.8 | 27690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 6691. FC6H12CHO=IC4H8+ch2ch2hco | 8.24E+22 | -2.7 | 32770.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6692. IC3H7COC3H7-I+oh=IC3H7COC3H6-I+h2o | 3.06E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.08E+07 | 1.5 | 28210.0 |
| 6693. IC3H7COC3H7-I+oh=IC3H7COC3H6-T+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.16E+13 | -0.1 | 29830.0 |
| 6694. IC3H7COC3H7-I+ho2=IC3H7COC3H6-I+h2o2 | 5.48E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.27E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 6695. IC3H7COC3H7-I+ho2=IC3H7COC3H6-T+h2o2 | 1.60E+11 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.26E+12 | -0.4 | 11070.0 |
| 6696. IC3H7COC3H7-I+ch3o2=IC3H7COC3H6-I+ch3o2h | 4.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.81E+04 | 2.0 | 2752.0 |
| 6697. IC3H7COC3H7-I+ch3o2=IC3H7COC3H6-T+ch3o2h | 7.22E+03 | 2.5 | 8032.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.04E+05 | 2.0 | 6464.0 |
| 6698. IC3H7COC3H6-I=c3h6+ic3h7co | 1.86E+19 | -1.7 | 28050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6699. IC3H7COC3H6-T=ic3h6co+ic3h7 | 1.22E+17 | -0.6 | 42050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6700. TC4H9COC2H5+oh=TC4H8COC2H5+h2o | 2.29E+08 | 1.5 | 775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.72E+07 | 1.5 | 20210.0 |
| 6701. TC4H9COC2H5+oh=TC4H9COC2H4P+h2o | 5.72E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 6702. TC4H9COC2H5+oh=TC4H9COC2H4S+h2o | 8.95E+11 | 0.0 | -228.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.59E+13 | -0.2 | 28620.0 |
| 6703. TC4H9COC2H5+ho2=TC4H8COC2H5+h2o2 | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.68E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 6704. TC4H9COC2H5+ho2=TC4H9COC2H4P+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.91E+04 | 2.2 | 4462.0 |
| 6705. TC4H9COC2H5+ho2=TC4H9COC2H4S+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.11E+13 | -0.6 | 6080.0 |
| 6706. TC4H9COC2H5+ch3o2=TC4H8COC2H5+ch3o2h | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+05 | 2.0 | 2752.0 |
| 6707. TC4H9COC2H5+ch3o2=TC4H9COC2H4P+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+13 | -0.5 | 6632.0 |
| 6708. TC4H9COC2H5+ch3o2=TC4H9COC2H4S+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.65E+14 | -0.7 | 11910.0 |
| 6709. TC4H8COC2H5=IC4H8+c2h5co | 2.90E+22 | -2.7 | 27530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6710. TC4H8COC2H5=IC3H5COC2H5+ch3 | 2.73E+16 | -1.1 | 28110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6711. TC4H9COC2H4P=c2h4+TC4H9CO | 2.70E+17 | -1.5 | 26110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 6712. TC4H9COC2H4S=ch3chco+TC4H9 | 4.60E+20 | -1.9 | 38250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6713. NEOC5H11COCH3+oh=NEOC5H11COCH2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+11 | 0.0 | 20630.0 |
| 6714. NEOC5H11COCH3+oh=NEOC5H10COCH3+h2o | 2.29E+08 | 1.5 | 775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.84E+07 | 1.5 | 20210.0 |
| 6715. NEOC5H11COCH3+oh=TC4H9CHCOCH3+h2o | 8.95E+11 | 0.0 | -228.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.82E+13 | -0.2 | 28640.0 |
| 6716. NEOC5H11COCH3+ho2=TC4H9CHCOCH3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.42E+13 | -0.6 | 6100.0 |
| 6717. NEOC5H11COCH3+ho2=NEOC5H11COCH2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.98E+04 | 2.2 | 3472.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6718. NEOC5H11COCH3+ho2=NEOC5H10COCH3+h2o2 | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.78E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 6719. NEOC5H11COCH3+ch3o2=NEOC5H11COCH2+ch3o2h | 3.01E+13 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.55E+14 | -0.5 | 4832.0 |
| 6720. NEOC5H11COCH3+ch3o2=NEOC5H10COCH3+ch3o2h | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.55E+05 | 2.0 | 2752.0 |
| 6721. NEOC5H11COCH3+ch3o2=TC4H9CHCOCH3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.94E+14 | -0.7 | 11930.0 |
| 6722. NEOC5H11COCH2=ch2co+NEOC5H11 | 7.58E+16 | -1.1 | 36710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6723. NEOC5H10COCH3=IC4H8+ch2coch3 | 1.27E+21 | -2.3 | 28580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6724. NEOC5H10COCH3=IC4H7COCH3+ch3 | 2.33E+17 | -1.2 | 32560.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6725. TC4H9CHCOCH3=IC3H6CHCOCH3+ch3 | 1.90E+18 | -1.3 | 34130.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 6726. XC7H13OOH-X1=XC7H13O-X1+oh | 2.02E+20 | -1.6 | 47710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6727. YC7H13OOH-X1=YC7H13O-X1+oh | 4.18E+20 | -1.7 | 47810.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6728. XC7H13OOH-Z=XC7H13O-Z+oh | 3.76E+21 | -1.9 | 46430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6729. XC7H13OOH-Y2=XC7H13O-Y2+oh | 8.65E+19 | -1.3 | 46020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6730. YC7H13OOH-X2=YC7H13O-X2+oh | 1.88E+20 | -1.5 | 47030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6731. OC7H13OOH-N=OC7H13O-N+oh | 1.83E+20 | -1.5 | 47020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6732. OC7H13OOH-Q=OC7H13O-Q+oh | 4.19E+20 | -1.7 | 47840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6733. PC7H13OOH-O=PC7H13O-O+oh | 8.22E+19 | -1.2 | 42490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6734. XC7H13O-X1=ch2o+DC6H11-D | 2.90E+21 | -2.4 | 34880.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6735. YC7H13O-X1=ch2o+CC6H11-D | 2.66E+21 | -2.4 | 34870.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6736. XC7H13O-Y2=aceton+IC4H7 | 4.26E+19 | -1.7 | 16530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6737. YC7H13O-X2=ch2o+CC6H11-B | 5.29E+25 | -2.1 | 35170.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 6738. OC7H13O-N=ch2o+CC6H11-B | 1.14E+18 | -1.8 | 2305.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 6739. OC7H13O-Q=ch2o+NEOC6H11 | 2.72E+16 | -1.0 | 29510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 6740. ACC6H10+oh=ACC6H9-A+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.49E+08 | 1.4 | 32460.0 |
| 6741. ACC6H10+oh=ACC6H9-D+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.49E+08 | 1.4 | 32460.0 |
| 6742. ACC6H10+ho2=ACC6H9-A+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.01E+07 | 1.7 | 15210.0 |
| 6743. ACC6H10+ho2=ACC6H9-D+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.01E+07 | 1.7 | 15210.0 |
| 6744. ACC6H10+ch3o2=ACC6H9-A+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.14E+07 | 1.5 | 14490.0 |
| 6745. ACC6H10+ch3o2=ACC6H9-D+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.14E+07 | 1.5 | 14490.0 |
| 6746. ACC6H9-A=ac3h4+sc3h5 | 1.19E+24 | -2.9 | 74310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 6747. ACC6H9-D+ho2=ic3h5cho+c2h3+oh | 8.91E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 6748. IC6H14=IC4H9+c2h5 | 5.29E+23 | -2.2 | 88670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6749. IC6H14=ic3h7+nc3h7 | 3.48E+25 | -2.6 | 88150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6750. IC6H14=DC5H11+ch3 | 1.30E+22 | -1.8 | 89660.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6751. IC6H14=Bc5h11+ch3 | 1.40E+19 | -0.7 | 87100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6752. IC6H14=AC6H13+h | 6.79E+16 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6753. IC6H14=BC6H13+h | 3.68E+18 | -0.9 | 96720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6754. IC6H14=CC6H13+h | 1.00E+18 | -0.7 | 98700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6755. IC6H14=DC6H13+h | 1.00E+18 | -0.7 | 98700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6756. IC6H14=EC6H13+h | 6.79E+16 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6757. IC6H14+h=AC6H13+h2 | 1.88E+05 | 2.8 | 6280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.99E+01 | 3.4 | 8620.0 |
| 6758. IC6H14+h=BC6H13+h2 | 6.02E+05 | 2.4 | 2583.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.36E+00 | 3.6 | 9425.0 |
| 6759. IC6H14+h=CC6H13+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.86E+01 | 3.4 | 9326.0 |
| 6760. IC6H14+h=DC6H13+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.86E+01 | 3.4 | 9326.0 |
| 6761. IC6H14+h=EC6H13+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+01 | 3.4 | 8620.0 |
| 6762. IC6H14+o=AC6H13+oh | 2.70E+07 | 2.0 | 5136.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.01E+03 | 2.6 | 6064.0 |
| 6763. IC6H14+o=BC6H13+oh | 3.97E+05 | 2.4 | 1150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.16E-01 | 3.6 | 6580.0 |
| 6764. IC6H14+o=CC6H13+oh | 5.95E+05 | 2.4 | 2846.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.48E+00 | 3.4 | 6289.0 |
| 6765. IC6H14+o=DC6H13+oh | 5.95E+05 | 2.4 | 2846.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.48E+00 | 3.4 | 6289.0 |
| 6766. IC6H14+o=EC6H13+oh | 1.05E+06 | 2.4 | 4766.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.17E+02 | 3.0 | 5694.0 |
| 6767. IC6H14+oh=AC6H13+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.38E+07 | 1.5 | 18820.0 |
| 6768. IC6H14+oh=BC6H13+h2o | 5.73E+10 | 0.5 | 63.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.39E+06 | 1.6 | 21800.0 |
| 6769. IC6H14+oh=CC6H13+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.13E+03 | 2.5 | 19710.0 |
| 6770. IC6H14+oh=DC6H13+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.13E+03 | 2.5 | 19710.0 |
| 6771. IC6H14+oh=EC6H13+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E+07 | 1.5 | 18820.0 |
| 6772. IC6H14+ch3=AC6H13+ch4 | 9.07E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.76E-01 | 3.8 | 11030.0 |
| 6773. IC6H14+ch3=BC6H13+ch4 | 6.01E-10 | 6.4 | 893.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.15E-12 | 7.1 | 9275.0 |
| 6774. IC6H14+ch3=CC6H13+ch4 | 8.40E+04 | 2.1 | 7574.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.10E+03 | 2.7 | 13970.0 |
| 6775. IC6H14+ch3=DC6H13+ch4 | 8.40E+04 | 2.1 | 7574.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.10E+03 | 2.7 | 13970.0 |
| 6776. IC6H14+ch3=EC6H13+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.76E-02 | 3.8 | 11030.0 |
| 6777. IC6H14+ho2=AC6H13+h2o2 | 8.10E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.96E+03 | 2.4 | 3030.0 |
| 6778. IC6H14+ho2=BC6H13+h2o2 | 1.50E+04 | 2.5 | 12260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.40E+01 | 3.0 | 3101.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6779. IC6H14+ho2=CC6H13+h2o2 | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.88E+02 | 2.8 | 3717.0 |
| 6780. IC6H14+ho2=DC6H13+h2o2 | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.88E+02 | 2.8 | 3717.0 |
| 6781. IC6H14+ho2=EC6H13+h2o2 | 4.05E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.98E+03 | 2.4 | 3030.0 |
| 6782. IC6H14+ch3o=AC6H13+ch3oh | 3.20E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6783. IC6H14+ch3o=BC6H13+ch3oh | 1.90E+10 | 0.0 | 2800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 5200.0 |
| 6784. IC6H14+ch3o=CC6H13+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.91E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 6785. IC6H14+ch3o=DC6H13+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.91E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 6786. IC6H14+ch3o=EC6H13+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6787. IC6H14+o2=AC6H13+ho2 | 4.20E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.68E+10 | 0.3 | 456.0 |
| 6788. IC6H14+o2=BC6H13+ho2 | 7.00E+12 | 0.0 | 48000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+08 | 0.8 | 157.9 |
| 6789. IC6H14+o2=CC6H13+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 50160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.05E+09 | 0.6 | 321.0 |
| 6790. IC6H14+o2=DC6H13+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 50160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.05E+09 | 0.6 | 321.0 |
| 6791. IC6H14+o2=EC6H13+ho2 | 2.10E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.34E+10 | 0.3 | 456.0 |
| 6792. IC6H14+c2h5=AC6H13+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6793. IC6H14+c2h5=BC6H13+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 7900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+11 | 0.0 | 21000.0 |
| 6794. IC6H14+c2h5=CC6H13+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 6795. IC6H14+c2h5=DC6H13+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 6796. IC6H14+c2h5=EC6H13+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.24E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6797. IC6H14+c2h3=AC6H13+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 6798. IC6H14+c2h3=BC6H13+c2h4 | 2.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 23000.0 |
| 6799. IC6H14+c2h3=CC6H13+c2h4 | 3.98E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 6800. IC6H14+c2h3=DC6H13+c2h4 | 3.98E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 6801. IC6H14+c2h3=EC6H13+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.51E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 6802. IC6H14+ch3o2=AC6H13+ch3o2h | 8.10E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.94E+05 | 2.0 | 1435.0 |
| 6803. IC6H14+ch3o2=BC6H13+ch3o2h | 1.50E+04 | 2.5 | 12260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.62E+02 | 2.6 | 1506.0 |
| 6804. IC6H14+ch3o2=CC6H13+ch3o2h | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.50E+03 | 2.3 | 2122.0 |
| 6805. IC6H14+ch3o2=DC6H13+ch3o2h | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.50E+03 | 2.3 | 2122.0 |
| 6806. IC6H14+ch3o2=EC6H13+ch3o2h | 4.05E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.69E+04 | 2.0 | 14350.0 |
| 6807. IC6H14+AC6H13=BC6H13+IC6H14 | 2.50E+10 | 0.0 | 7900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6808. IC6H14+AC6H13=CC6H13+IC6H14 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6809. IC6H14+AC6H13=DC6H13+IC6H14 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6810. IC6H14+AC6H13=EC6H13+IC6H14 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6811. IC6H14+BC6H13=CC6H13+IC6H14 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 7900.0 |
| 6812. IC6H14+BC6H13=DC6H13+IC6H14 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 7900.0 |
| 6813. IC6H14+BC6H13=EC6H13+IC6H14 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 7900.0 |
| 6814. IC6H14+CC6H13=DC6H13+IC6H14 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 6815. IC6H14+CC6H13=EC6H13+IC6H14 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 6816. IC6H14+DC6H13=EC6H13+IC6H14 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 6817. IC6H14+o2cho=AC6H13+ho2cho | 1.68E+13 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+03 | 2.3 | 3065.0 |
| 6818. IC6H14+o2cho=BC6H13+ho2cho | 2.80E+12 | 0.0 | 16010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.50E+00 | 2.9 | 3145.0 |
| 6819. IC6H14+o2cho=CC6H13+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.56E+01 | 2.6 | 2831.0 |
| 6820. IC6H14+o2cho=DC6H13+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.56E+01 | 2.6 | 2831.0 |
| 6821. IC6H14+o2cho=EC6H13+ho2cho | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.69E+02 | 2.3 | 3065.0 |
| 6822. NEOC6H14=BC5H11+ch3 | 5.74E+26 | -2.8 | 88400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6823. NEOC6H14=TC4H9+c2h5 | 1.35E+28 | -3.2 | 87450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6824. NEOC6H14=NEOC5H11+ch3 | 1.06E+18 | -0.5 | 88090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 6825. NEOC6H14=FC6H13+h | 2.05E+17 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6826. NEOC6H14=GC6H13+h | 1.13E+18 | -0.7 | 98730.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6827. NEOC6H14=HC6H13+h | 6.84E+16 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 6828. NEOC6H14+h=FC6H13+h2 | 9.79E+05 | 2.8 | 8147.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.89E+01 | 3.4 | 10480.0 |
| 6829. NEOC6H14+h=GC6H13+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E+01 | 3.4 | 9304.0 |
| 6830. NEOC6H14+h=HC6H13+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.98E+01 | 3.4 | 8612.0 |
| 6831. NEOC6H14+o=FC6H13+oh | 4.05E+07 | 2.0 | 5136.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+03 | 2.6 | 6056.0 |
| 6832. NEOC6H14+o=GC6H13+oh | 5.95E+05 | 2.4 | 2846.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.99E+00 | 3.4 | 6267.0 |
| 6833. NEOC6H14+o=HC6H13+oh | 1.05E+06 | 2.4 | 4766.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.16E+02 | 3.0 | 5686.0 |
| 6834. NEOC6H14+oh=FC6H13+h2o | 2.37E+07 | 1.8 | 298.1 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.78E+04 | 2.3 | 17520.0 |
| 6835. NEOC6H14+oh=GC6H13+h2o | 4.70E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.39E+03 | 2.5 | 19690.0 |
| 6836. NEOC6H14+oh=HC6H13+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+07 | 1.5 | 18810.0 |
| 6837. NEOC6H14+ch3=FC6H13+ch4 | 1.36E+00 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.72E-02 | 3.8 | 11030.0 |
| 6838. NEOC6H14+ch3=GC6H13+ch4 | 8.40E+04 | 2.1 | 7574.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.79E+02 | 2.7 | 13950.0 |
| 6839. NEOC6H14+ch3=HC6H13+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.70E-02 | 3.8 | 11030.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6840. NEOC6H14+ho2=FC6H13+h2o2 | 8.10E+04 | 2.5 | 16680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.30E+03 | 2.4 | 3012.0 |
| 6841. NEOC6H14+ho2=GC6H13+h2o2 | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.35E+02 | 2.8 | 3695.0 |
| 6842. NEOC6H14+ho2=HC6H13+h2o2 | 4.05E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.94E+03 | 2.4 | 3022.0 |
| 6843. NEOC6H14+ch3o=FC6H13+ch3oh | 4.80E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6844. NEOC6H14+ch3o=GC6H13+ch3oh | 1.09E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.90E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 6845. NEOC6H14+ch3o=HC6H13+ch3oh | 1.60E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 6846. NEOC6H14+o2=FC6H13+ho2 | 6.30E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.33E+10 | 0.3 | 448.0 |
| 6847. NEOC6H14+o2=GC6H13+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 50160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.38E+08 | 0.6 | 299.0 |
| 6848. NEOC6H14+o2=HC6H13+ho2 | 2.10E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.32E+10 | 0.3 | 448.0 |
| 6849. NEOC6H14+c2h5=FC6H13+c2h6 | 1.50E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6850. NEOC6H14+c2h5=GC6H13+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 6851. NEOC6H14+c2h5=HC6H13+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6852. NEOC6H14+c2h3=FC6H13+c2h4 | 1.50E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 6853. NEOC6H14+c2h3=GC6H13+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 6854. NEOC6H14+c2h3=HC6H13+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 6855. NEOC6H14+ch3o2=FC6H13+ch3o2h | 8.10E+04 | 2.5 | 16680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.42E+04 | 2.0 | 1417.0 |
| 6856. NEOC6H14+ch3o2=GC6H13+ch3o2h | 5.88E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.46E+03 | 2.4 | 2100.0 |
| 6857. NEOC6H14+ch3o2=HC6H13+ch3o2h | 4.05E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.62E+04 | 2.0 | 1427.0 |
| 6858. NEOC6H14+FC6H13=GC6H13+NEOC6H14 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6859. NEOC6H14+FC6H13=HC6H13+NEOC6H14 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.25E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 6860. NEOC6H14+GC6H13=HC6H13+NEOC6H14 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 6861. NEOC6H14+o2cho=FC6H13+ho2cho | 2.52E+13 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.66E+02 | 2.3 | 3057.0 |
| 6862. NEOC6H14+o2cho=GC6H13+ho2cho | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.28E+01 | 2.6 | 2809.0 |
| 6863. NEOC6H14+o2cho=HC6H13+ho2cho | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.65E+02 | 2.3 | 3057.0 |
| 6864. FC6H13O2+NEOC6H14=FC6H13O2H+FC6H13 | 1.81E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6865. GC6H13O2+NEOC6H14=GC6H13O2H+FC6H13 | 1.81E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6866. HC6H13O2+NEOC6H14=HC6H13O2H+FC6H13 | 1.81E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6867. FC6H13O2+NEOC6H14=FC6H13O2H+GC6H13 | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6868. GC6H13O2+NEOC6H14=GC6H13O2H+GC6H13 | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6869. HC6H13O2+NEOC6H14=HC6H13O2H+GC6H13 | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6870. FC6H13O2+NEOC6H14=FC6H13O2H+HC6H13 | 6.05E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6871. GC6H13O2+NEOC6H14=GC6H13O2H+HC6H13 | 6.05E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6872. HC6H13O2+NEOC6H14=HC6H13O2H+HC6H13 | 6.05E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 6873. FC6H13O2=FC6H13+o2 | 1.23E+20 | -1.7 | 35760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6874. GC6H13O2=GC6H13+o2 | 1.85E+23 | -2.4 | 38080.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6875. HC6H13O2=HC6H13+o2 | 4.49E+20 | -1.7 | 35760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 6876. FC6H13+FC6H13O2=FC6H13O+FC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.49E+13 | -0.2 | 29820.0 |
| 6877. FC6H13+GC6H13O2=FC6H13O+GC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.59E+13 | -0.1 | 29450.0 |
| 6878. FC6H13+HC6H13O2=FC6H13O+HC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.84E+13 | -0.2 | 29820.0 |
| 6879. GC6H13+FC6H13O2=GC6H13O+FC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.19E+15 | -0.8 | 31770.0 |
| 6880. GC6H13+GC6H13O2=GC6H13O+GC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.80E+15 | -0.7 | 31400.0 |
| 6881. GC6H13+HC6H13O2=GC6H13O+HC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.07E+15 | -0.8 | 31770.0 |
| 6882. HC6H13+FC6H13O2=HC6H13O+FC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.84E+13 | -0.2 | 29820.0 |
| 6883. HC6H13+GC6H13O2=HC6H13O+GC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.64E+12 | -0.1 | 29450.0 |
| 6884. HC6H13+HC6H13O2=HC6H13O+HC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.47E+12 | -0.2 | 29820.0 |
| 6885. FC6H13O2=FC6H12OOH-F | 7.50E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.77E+11 | -0.6 | 9010.0 |
| 6886. FC6H13O2=FC6H12OOH-G | 2.50E+10 | 0.0 | 20850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.94E+09 | -0.1 | 7870.0 |
| 6887. FC6H13O2=FC6H12OOH-H | 4.69E+09 | 0.0 | 22350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.73E+10 | -0.6 | 6960.0 |
| 6888. GC6H13O2=GC6H12OOH-F | 1.12E+11 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.82E+11 | -0.6 | 9040.0 |
| 6889. GC6H13O2=GC6H12OOH-H | 3.00E+11 | 0.0 | 29400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.46E+12 | -0.6 | 14040.0 |
| 6890. HC6H13O2=HC6H12OOH-F | 1.41E+10 | 0.0 | 22350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+10 | -0.5 | 6900.0 |
| 6891. HC6H13O2=HC6H12OOH-G | 2.00E+11 | 0.0 | 26850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.94E+10 | -0.1 | 13830.0 |
| 6892. GC6H13O2=NEOC6H12+ho2 | 5.07E+42 | -9.4 | 41490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.76E+32 | -7.2 | 15650.0 |
| 6893. HC6H13O2=NEOC6H12+ho2 | 5.04E+38 | -8.1 | 40490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+30 | -6.2 | 19470.0 |
| 6894. FC6H13O2+ho2=FC6H13O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.79E+13 | -0.8 | 33620.0 |
| 6895. GC6H13O2+ho2=GC6H13O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.50E+13 | -0.8 | 33640.0 |
| 6896. HC6H13O2+ho2=HC6H13O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.79E+13 | -0.8 | 33620.0 |
| 6897. FC6H13O2+h2o2=FC6H13O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 6898. GC6H13O2+h2o2=GC6H13O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 6899. HC6H13O2+h2o2=HC6H13O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 6900. FC6H13O2+ch3o2=FC6H13O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |

```
6901. GC6H13O2+ch3o2=GC6H13O+ch3o+o2              1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6902. HC6H13O2+ch3o2=HC6H13O+ch3o+o2              1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6903. FC6H13O2+FC6H13O2=o2+FC6H13O+FC6H13O        1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6904. FC6H13O2+GC6H13O2=o2+FC6H13O+GC6H13O        1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6905. FC6H13O2+HC6H13O2=o2+FC6H13O+HC6H13O        1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6906. GC6H13O2+GC6H13O2=o2+GC6H13O+GC6H13O        1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6907. GC6H13O2+HC6H13O2=o2+GC6H13O+HC6H13O        1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6908. HC6H13O2+HC6H13O2=o2+HC6H13O+HC6H13O        1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
6909. AC6H13O2+IC6H14=AC6H13O2H+AC6H13            1.21E+13    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6910. BC6H13O2+IC6H14=BC6H13O2H+AC6H13            1.21E+13    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6911. CC6H13O2+IC6H14=CC6H13O2H+AC6H13            1.21E+13    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6912. DC6H13O2+IC6H14=DC6H13O2H+AC6H13            1.21E+13    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6913. EC6H13O2+IC6H14=EC6H13O2H+AC6H13            1.21E+13    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6914. AC6H13O2+IC6H14=AC6H13O2H+BC6H13            2.02E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6915. BC6H13O2+IC6H14=BC6H13O2H+BC6H13            2.02E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6916. CC6H13O2+IC6H14=CC6H13O2H+BC6H13            2.02E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6917. DC6H13O2+IC6H14=DC6H13O2H+BC6H13            2.02E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6918. EC6H13O2+IC6H14=EC6H13O2H+BC6H13            2.02E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6919. AC6H13O2+IC6H14=AC6H13O2H+CC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6920. BC6H13O2+IC6H14=BC6H13O2H+CC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6921. CC6H13O2+IC6H14=CC6H13O2H+CC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6922. DC6H13O2+IC6H14=DC6H13O2H+CC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6923. EC6H13O2+IC6H14=EC6H13O2H+CC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6924. AC6H13O2+IC6H14=AC6H13O2H+DC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6925. BC6H13O2+IC6H14=BC6H13O2H+DC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6926. CC6H13O2+IC6H14=CC6H13O2H+DC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6927. DC6H13O2+IC6H14=DC6H13O2H+DC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6928. EC6H13O2+IC6H14=EC6H13O2H+DC6H13            4.03E+12    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6929. AC6H13O2+IC6H14=AC6H13O2H+EC6H13            6.05E+12    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6930. BC6H13O2+IC6H14=BC6H13O2H+EC6H13            6.05E+12    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6931. CC6H13O2+IC6H14=CC6H13O2H+EC6H13            6.05E+12    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6932. DC6H13O2+IC6H14=DC6H13O2H+EC6H13            6.05E+12    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6933. EC6H13O2+IC6H14=EC6H13O2H+EC6H13            6.05E+12    0.0    20430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.44E+10    0.0    15000.0
6934. AC6H13O2=AC6H13+o2                          1.61E+20   -1.6    35710.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.52E+12    0.0        0.0
6935. BC6H13O2=BC6H13+o2                          3.30E+24   -2.5    37300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.41E+13    0.0        0.0
6936. CC6H13O2=CC6H13+o2                          7.40E+22   -2.3    37990.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             7.54E+12    0.0        0.0
6937. DC6H13O2=DC6H13+o2                          7.40E+22   -2.3    37990.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             7.54E+12    0.0        0.0
6938. EC6H13O2=EC6H13+o2                          3.20E+20   -1.6    35710.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.52E+12    0.0        0.0
6939. AC6H13O2=AC6H12OOH-A                        3.75E+10    0.0    24400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.19E+11   -0.6     9010.0
6940. AC6H13O2=AC6H12OOH-B                        1.00E+11    0.0    24100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             3.33E+09    0.0    13010.0
6941. AC6H13O2=AC6H12OOH-C                        2.50E+10    0.0    20850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.23E+09   -0.2     7910.0
6942. AC6H13O2=AC6H12OOH-D                        3.12E+09    0.0    19050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             5.28E+08   -0.2     6110.0
6943. AC6H13O2=AC6H12OOH-E                        5.86E+08    0.0    25550.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             3.42E+09   -0.6    10160.0
6944. BC6H13O2=BC6H12OOH-A                        6.00E+11    0.0    29400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.34E+12   -0.5    13930.0
6945. BC6H13O2=BC6H12OOH-C                        2.00E+11    0.0    26850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.91E+10   -0.1    13890.0
6946. BC6H13O2=BC6H12OOH-D                        2.50E+10    0.0    20850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.39E+09   -0.1     7890.0
6947. BC6H13O2=BC6H12OOH-E                        4.69E+09    0.0    22350.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.04E+10   -0.5     6880.0
6948. CC6H13O2=CC6H12OOH-A                        7.50E+10    0.0    24400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             3.46E+11   -0.6     9040.0
6949. CC6H13O2=CC6H12OOH-B                        1.00E+11    0.0    24100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.06E+10   -0.1    13050.0
6950. CC6H13O2=CC6H12OOH-D                        2.00E+11    0.0    26850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.83E+10   -0.1    13900.0
6951. CC6H13O2=CC6H12OOH-E                        3.75E+10    0.0    24400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.60E+11   -0.6     9040.0
6952. DC6H13O2=DC6H12OOH-A                        9.38E+09    0.0    22350.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.32E+10   -0.6     6990.0
6953. DC6H13O2=DC6H12OOH-B                        1.25E+10    0.0    19100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.33E+09   -0.1     8050.0
6954. DC6H13O2=DC6H12OOH-C                        2.00E+11    0.0    26850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.83E+10   -0.1    13900.0
6955. DC6H13O2=DC6H12OOH-E                        3.00E+11    0.0    29400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.08E+12   -0.6    14040.0
6956. EC6H13O2=EC6H12OOH-A                        1.17E+09    0.0    25550.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.55E+09   -0.6    10160.0
6957. EC6H13O2=EC6H12OOH-B                        1.56E+09    0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             3.12E+08    0.0     5960.0
6958. EC6H13O2=EC6H12OOH-C                        2.50E+10    0.0    20850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.27E+10   -0.2     7910.0
6959. EC6H13O2=EC6H12OOH-D                        2.00E+11    0.0    26850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.01E+11   -0.2    13910.0
6960. AC6H13O2=AC6H12+ho2                         4.53E+35   -7.2    39490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.26E+27   -5.4    20690.0
6961. BC6H13O2=AC6H12+ho2                         1.01E+43   -9.4    41490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.32E+32   -7.2    16600.0
```

```
6962. BC6H13O2=BC6H12+ho2                        5.04E+38   -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           5.63E+27   -5.7    18470.0
6963. CC6H13O2=BC6H12+ho2                        4.53E+35   -7.2    39490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           3.29E+25   -4.9    18770.0
6964. CC6H13O2=CC6H12+ho2                        5.04E+38   -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           7.85E+28   -5.8    18350.0
6965. DC6H13O2=CC6H12+ho2                        5.04E+38   -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           7.85E+28   -5.8    18350.0
6966. DC6H13O2=DC6H12+ho2                        5.07E+42   -9.4    41490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.68E+33   -7.3    16750.0
6967. EC6H13O2=DC6H12+ho2                        5.04E+38   -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.57E+30   -6.3    20540.0
6968. AC6H13O2+ho2=AC6H13O2H+o2                  1.75E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           3.83E+13   -0.8    33610.0
6969. BC6H13O2+ho2=BC6H13O2H+o2                  1.75E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           3.50E+13   -0.8    33600.0
6970. CC6H13O2+ho2=CC6H13O2H+o2                  1.75E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           4.43E+13   -0.8    33640.0
6971. DC6H13O2+ho2=DC6H13O2H+o2                  1.75E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           4.43E+13   -0.8    33640.0
6972. EC6H13O2+ho2=EC6H13O2H+o2                  1.75E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           3.83E+13   -0.8    33610.0
6973. AC6H13O2+h2o2=AC6H13O2H+ho2                2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.40E+12    0.0    10000.0
6974. BC6H13O2+h2o2=BC6H13O2H+ho2                2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.40E+12    0.0    10000.0
6975. CC6H13O2+h2o2=CC6H13O2H+ho2                2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.40E+12    0.0    10000.0
6976. DC6H13O2+h2o2=DC6H13O2H+ho2                2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.40E+12    0.0    10000.0
6977. EC6H13O2+h2o2=EC6H13O2H+ho2                2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.40E+12    0.0    10000.0
6978. AC6H13O2+ch3o2=AC6H13O+ch3o+o2             1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6979. BC6H13O2+ch3o2=BC6H13O+ch3o+o2             1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6980. CC6H13O2+ch3o2=CC6H13O+ch3o+o2             1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6981. DC6H13O2+ch3o2=DC6H13O+ch3o+o2             1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6982. EC6H13O2+ch3o2=EC6H13O+ch3o+o2             1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6983. AC6H13O2+AC6H13O2=o2+AC6H13O+AC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6984. AC6H13O2+BC6H13O2=o2+AC6H13O+BC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6985. AC6H13O2+CC6H13O2=o2+AC6H13O+CC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6986. AC6H13O2+DC6H13O2=o2+AC6H13O+DC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6987. AC6H13O2+EC6H13O2=o2+AC6H13O+EC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6988. BC6H13O2+BC6H13O2=o2+BC6H13O+BC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6989. BC6H13O2+CC6H13O2=o2+BC6H13O+CC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6990. BC6H13O2+DC6H13O2=o2+BC6H13O+DC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6991. BC6H13O2+EC6H13O2=o2+BC6H13O+EC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6992. CC6H13O2+CC6H13O2=o2+CC6H13O+CC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6993. CC6H13O2+DC6H13O2=o2+CC6H13O+DC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6994. CC6H13O2+EC6H13O2=o2+CC6H13O+EC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6995. DC6H13O2+DC6H13O2=o2+DC6H13O+DC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6996. DC6H13O2+EC6H13O2=o2+DC6H13O+EC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6997. EC6H13O2+EC6H13O2=o2+EC6H13O+EC6H13O       1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           0.00E+00    0.0        0.0
6998. FC6H13=IC4H8+c2h5                          6.34E+22   -2.7    32750.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+11    0.0    10600.0
6999. GC6H13=BC5H10+ch3                          4.53E+20   -2.1    33830.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+11    0.0    10600.0
7000. GC6H13=NEOC6H12+h                          6.32E+12    0.1    37830.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     1200.0
7001. HC6H13=c2h4+TC4H9                          5.46E+23   -3.0    30610.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.70E+11    0.0     8300.0
7002. HC6H13=NEOC6H12+h                          1.04E+14   -0.3    37030.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     2900.0
7003. GC6H13+o2=NEOC6H12+ho2                     4.50E-29    0.0     5020.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.00E-29    0.0    17500.0
7004. HC6H13+o2=NEOC6H12+ho2                     3.00E-29    0.0     3000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.00E-29    0.0    17500.0
7005. FC6H13=HC6H13                              3.00E+11    0.0    21100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           9.00E+11    0.0    21100.0
7006. FC6H13+ho2=FC6H13O+oh                      7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           2.84E+15   -0.5    26120.0
7007. GC6H13+ho2=GC6H13O+oh                      7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           3.08E+17   -1.1    28070.0
7008. HC6H13+ho2=HC6H13O+oh                      7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           9.49E+14   -0.5    26120.0
7009. FC6H13+ch3o2=FC6H13O+ch3o                  7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.78E+14   -0.2    30360.0
7010. GC6H13+ch3o2=GC6H13O+ch3o                  7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.92E+16   -0.8    32310.0
7011. HC6H13+ch3o2=HC6H13O+ch3o                  7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           5.94E+13   -0.2    30360.0
7012. AC6H13=nc3h7+c3h6                          1.82E+21   -2.2    32260.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.50E+11    0.0     9200.0
7013. AC6H13=c5h10+ch3                           2.12E+18   -1.4    33320.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.50E+11    0.0     9200.0
7014. AC6H13=AC6H12+h                            2.12E+14   -0.3    35160.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     3200.0
7015. BC6H13=IC4H8+c2h5                          1.05E+19   -1.6    30790.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.50E+11    0.0     7200.0
7016. BC6H13=AC6H12+h                            3.92E+12    0.3    37660.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     1200.0
7017. BC6H13=BC6H12+h                            8.02E+12    0.1    36490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     2900.0
7018. CC6H13=C5H10-2+ch3                         4.11E+18   -1.6    32980.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.50E+11    0.0     9200.0
7019. CC6H13=BC6H12+h                            2.94E+13   -0.1    34800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     3200.0
7020. CC6H13=CC6H12+h                            1.37E+13   -0.1    35920.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     2900.0
7021. DC6H13=ic3h7+c3h6                          7.77E+20   -2.2    30830.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.50E+11    0.0     7800.0
7022. DC6H13=CC6H12+h                            1.37E+13   -0.1    35920.0
       Reverse Arrhenius coefficients:           1.00E+13    0.0     2900.0
```

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7023. DC6H13=DC6H12+h | 6.43E+12 | 0.1 | 36820.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 1200.0 |
| 7024. EC6H13=IC4H9+c2h4 | 2.15E+19 | -1.9 | 30740.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.70E+11 | 0.0 | 7200.0 |
| 7025. EC6H13=DC6H12+h | 9.53E+13 | -0.3 | 36010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 2900.0 |
| 7026. AC6H13+o2=AC6H12+ho2 | 1.50E-19 | 0.0 | 2000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7027. BC6H13+o2=AC6H12+ho2 | 9.00E-19 | 0.0 | 5020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7028. BC6H13+o2=BC6H12+ho2 | 3.00E-19 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7029. CC6H13+o2=BC6H12+ho2 | 1.50E-19 | 0.0 | 2000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7030. CC6H13+o2=CC6H12+ho2 | 3.00E-19 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7031. DC6H13+o2=CC6H12+ho2 | 3.00E-19 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7032. DC6H13+o2=DC6H12+ho2 | 4.50E-19 | 0.0 | 5020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7033. EC6H13+o2=DC6H12+ho2 | 3.00E-19 | 0.0 | 3000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7034. AC6H13=DC6H13 | 2.00E+11 | 0.0 | 18100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.00E+11 | 0.0 | 21100.0 |
| 7035. AC6H13=EC6H13 | 3.00E+11 | 0.0 | 14100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.00E+11 | 0.0 | 14100.0 |
| 7036. BC6H13=EC6H13 | 3.00E+11 | 0.0 | 21100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 16100.0 |
| 7037. AC6H13+AC6H13O2=AC6H13O+AC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.81E+13 | -0.2 | 29790.0 |
| 7038. AC6H13+BC6H13O2=AC6H13O+BC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.30E+13 | -0.2 | 30590.0 |
| 7039. AC6H13+CC6H13O2=AC6H13O+CC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.58E+13 | -0.2 | 29500.0 |
| 7040. AC6H13+DC6H13O2=AC6H13O+DC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.58E+13 | -0.2 | 29500.0 |
| 7041. AC6H13+EC6H13O2=AC6H13O+EC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.81E+13 | -0.2 | 29790.0 |
| 7042. BC6H13+AC6H13O2=BC6H13O+AC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+17 | -1.1 | 32180.0 |
| 7043. BC6H13+BC6H13O2=BC6H13O+BC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.12E+16 | -1.1 | 32980.0 |
| 7044. BC6H13+CC6H13O2=BC6H13O+CC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+17 | -1.1 | 31890.0 |
| 7045. BC6H13+DC6H13O2=BC6H13O+DC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+17 | -1.1 | 31890.0 |
| 7046. BC6H13+EC6H13O2=BC6H13O+EC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+17 | -1.1 | 32180.0 |
| 7047. CC6H13+AC6H13O2=CC6H13O+AC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.89E+15 | -0.8 | 31780.0 |
| 7048. CC6H13+BC6H13O2=CC6H13O+BC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.96E+15 | -0.8 | 32580.0 |
| 7049. CC6H13+CC6H13O2=CC6H13O+CC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.30E+15 | -0.8 | 31480.0 |
| 7050. CC6H13+DC6H13O2=CC6H13O+DC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.30E+15 | -0.8 | 31480.0 |
| 7051. CC6H13+EC6H13O2=CC6H13O+EC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.89E+15 | -0.8 | 31780.0 |
| 7052. DC6H13+AC6H13O2=DC6H13O+AC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.89E+15 | -0.8 | 31780.0 |
| 7053. DC6H13+BC6H13O2=DC6H13O+BC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.96E+15 | -0.8 | 32580.0 |
| 7054. DC6H13+CC6H13O2=DC6H13O+CC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.30E+15 | -0.8 | 31480.0 |
| 7055. DC6H13+DC6H13O2=DC6H13O+DC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.30E+15 | -0.8 | 31480.0 |
| 7056. DC6H13+EC6H13O2=DC6H13O+EC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.89E+15 | -0.8 | 31780.0 |
| 7057. EC6H13+AC6H13O2=EC6H13O+AC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.59E+13 | -0.2 | 29790.0 |
| 7058. EC6H13+BC6H13O2=EC6H13O+BC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.58E+13 | -0.2 | 30590.0 |
| 7059. EC6H13+CC6H13O2=EC6H13O+CC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.14E+13 | -0.2 | 29500.0 |
| 7060. EC6H13+DC6H13O2=EC6H13O+DC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.14E+13 | -0.2 | 29500.0 |
| 7061. EC6H13+EC6H13O2=EC6H13O+EC6H13O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.59E+13 | -0.2 | 29790.0 |
| 7062. AC6H13+ho2=AC6H13O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+15 | -0.5 | 26090.0 |
| 7063. BC6H13+ho2=BC6H13O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+18 | -1.4 | 28480.0 |
| 7064. CC6H13+ho2=CC6H13O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.96E+17 | -1.1 | 28070.0 |
| 7065. DC6H13+ho2=DC6H13O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.96E+17 | -1.1 | 28070.0 |
| 7066. EC6H13+ho2=EC6H13O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.27E+15 | -0.5 | 26090.0 |
| 7067. AC6H13+ch3o2=AC6H13O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.12E+13 | -0.2 | 30330.0 |
| 7068. BC6H13+ch3o2=BC6H13O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.83E+17 | -1.1 | 32720.0 |
| 7069. CC6H13+ch3o2=CC6H13O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.85E+16 | -0.8 | 32310.0 |
| 7070. DC6H13+ch3o2=DC6H13O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.85E+16 | -0.8 | 32310.0 |
| 7071. EC6H13+ch3o2=EC6H13O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+14 | -0.2 | 30330.0 |
| 7072. NEOC6H12=ch3+CC5H9-B | 1.53E+23 | -2.2 | 74190.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7073. NEOC6H12+oh=NEOC6H11+h2o | 3.00E+13 | 0.0 | 1230.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.80E+10 | 0.6 | 10480.0 |
| 7074. NEOC6H12+h=NEOC6H11+h2 | 3.70E+13 | 0.0 | 3900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+10 | 0.7 | -1740.0 |
| 7075. NEOC6H12+ch3=NEOC6H11+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 7300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.80E+11 | 0.2 | 3200.0 |
| 7076. NEOC6H12+o=NEOC6H11+oh | 4.34E+15 | -0.7 | 36950.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.00E+11 | 0.0 | 29900.0 |
| 7077. NEOC6H12+oh=NEOC5H11+ch2o | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7078. NEOC6H12+o=NEOC5H11+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7079. AC6H12+oh=Bc5h11+ch2o | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7080. BC6H12+oh=aceton+nc3h7 | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7081. BC6H12+oh=c2h5hco+ic3h7 | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7082. CC6H12+oh=IC4H9+ch3hco | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7083. DC6H12+oh=DC5H11+ch2o | 1.00E+11 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7084. AC6H12+o=Bc5h11+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7085. CC6H12+o=IC4H9+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7086. DC6H12+o=DC5H11+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7087. AC6H12=IC4H7+c2h5 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7088. BC6H12=ch3+CC5H9-B | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7089. CC6H12=ch3+Dc5h9-2 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7090. DC6H12=ic3h7+ac3h5 | 1.00E+16 | 0.0 | 71000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7091. AC6H12+h=AC6H11-A2+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.05E+06 | 1.9 | 20100.0 |
| 7092. AC6H12+h=AC6H11-C+h2 | 3.38E+05 | 2.4 | 207.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.37E+06 | 2.1 | 20330.0 |
| 7093. AC6H12+h=AC6H11-D+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.91E+03 | 2.7 | 11260.0 |
| 7094. AC6H12+h=AC6H11-E+h2 | 6.65E+05 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.08E+04 | 2.5 | 11040.0 |
| 7095. AC6H12+oh=AC6H11-A2+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.50E+08 | 1.4 | 32470.0 |
| 7096. AC6H12+oh=AC6H11-C+h2o | 2.76E+04 | 2.6 | -1919.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.55E+06 | 2.4 | 33360.0 |
| 7097. AC6H12+oh=AC6H11-D+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.08E+05 | 1.9 | 21910.0 |
| 7098. AC6H12+oh=AC6H11-E+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 7099. AC6H12+ch3=AC6H11-A2+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.35E+03 | 2.9 | 23760.0 |
| 7100. AC6H12+ch3=AC6H11-C+ch4 | 3.69E+00 | 3.3 | 4002.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+03 | 3.0 | 24600.0 |
| 7101. AC6H12+ch3=AC6H11-D+ch4 | 1.51E+00 | 3.5 | 5481.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E-01 | 3.8 | 12750.0 |
| 7102. AC6H12+ch3=AC6H11-E+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.46E-01 | 3.6 | 11910.0 |
| 7103. AC6H12+ho2=AC6H11-A2+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.01E+07 | 1.7 | 15210.0 |
| 7104. AC6H12+ho2=AC6H11-C+h2o2 | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+06 | 2.0 | 14340.0 |
| 7105. AC6H12+ho2=AC6H11-D+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.46E+02 | 2.6 | 4392.0 |
| 7106. AC6H12+ho2=AC6H11-E+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.83E+04 | 2.2 | 4466.0 |
| 7107. AC6H12+ch3o2=AC6H11-A2+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.10E+07 | 1.5 | 12190.0 |
| 7108. AC6H12+ch3o2=AC6H11-C+ch3o2h | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.34E+06 | 1.8 | 11320.0 |
| 7109. AC6H12+ch3o2=AC6H11-D+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.55E+03 | 2.4 | 1372.0 |
| 7110. AC6H12+ch3o2=AC6H11-E+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.89E+04 | 2.0 | 1446.0 |
| 7111. AC6H12+ch3o=AC6H11-A2+ch3oh | 9.00E+01 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.77E+03 | 2.4 | 27870.0 |
| 7112. AC6H12+ch3o=AC6H11-C+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+02 | 2.7 | 27000.0 |
| 7113. AC6H12+ch3o=AC6H11-D+ch3oh | 1.45E+11 | 0.0 | 4571.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.10E+08 | 0.4 | 9631.0 |
| 7114. AC6H12+ch3o=AC6H11-E+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.84E+09 | 0.0 | 9008.0 |
| 7115. BC6H12+h=AC6H11-C+h2 | 3.46E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.18E+06 | 2.1 | 19740.0 |
| 7116. BC6H12+h=CC6H11-B+h2 | 3.38E+05 | 2.4 | 207.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+06 | 2.3 | 21040.0 |
| 7117. BC6H12+h=BC6H11-E+h2 | 6.65E+05 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.09E+04 | 2.5 | 11040.0 |
| 7118. BC6H12+oh=AC6H11-C+h2o | 6.24E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.17E+08 | 1.6 | 32110.0 |
| 7119. BC6H12+oh=CC6H11-B+h2o | 2.76E+04 | 2.6 | -1919.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.85E+05 | 2.5 | 34070.0 |
| 7120. BC6H12+oh=BC6H11-E+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 7121. BC6H12+ch3=AC6H11-C+ch4 | 4.42E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.06E+03 | 3.1 | 23410.0 |
| 7122. BC6H12+ch3=CC6H11-B+ch4 | 3.69E+00 | 3.3 | 4002.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.13E+02 | 3.2 | 25310.0 |
| 7123. BC6H12+ch3=BC6H11-E+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.49E-01 | 3.6 | 11910.0 |
| 7124. BC6H12+ho2=AC6H11-C+h2o2 | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.32E+07 | 1.8 | 14850.0 |
| 7125. BC6H12+ho2=CC6H11-B+h2o2 | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.16E+05 | 2.1 | 15050.0 |
| 7126. BC6H12+ho2=BC6H11-E+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.84E+04 | 2.2 | 4466.0 |
| 7127. BC6H12+ch3o2=AC6H11-C+ch3o2h | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.74E+07 | 1.7 | 11830.0 |
| 7128. BC6H12+ch3o2=CC6H11-B+ch3o2h | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.91E+06 | 1.9 | 12030.0 |
| 7129. BC6H12+ch3o2=BC6H11-E+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.92E+04 | 2.0 | 1446.0 |
| 7130. BC6H12+ch3o=AC6H11-C+ch3oh | 1.80E+02 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.30E+03 | 2.5 | 27510.0 |
| 7131. BC6H12+ch3o=CC6H11-B+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.43E+02 | 2.8 | 27710.0 |
| 7132. BC6H12+ch3o=BC6H11-E+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.86E+09 | 0.0 | 9008.0 |
| 7133. CC6H12+h=CC6H11-A+h2 | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.09E+04 | 2.5 | 11050.0 |
| 7134. CC6H12+h=CC6H11-B+h2 | 2.65E+06 | 2.2 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.15E+06 | 2.1 | 22250.0 |
| 7135. CC6H12+h=DC6H11-C+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.83E+06 | 2.1 | 20020.0 |
| 7136. CC6H12+oh=CC6H11-A+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.09E+09 | 1.0 | 21030.0 |
| 7137. CC6H12+oh=CC6H11-B+h2o | 6.14E+02 | 3.2 | -3500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.18E+03 | 3.1 | 33910.0 |
| 7138. CC6H12+oh=DC6H11-C+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.77E+08 | 1.6 | 32390.0 |
| 7139. CC6H12+ch3=CC6H11-A+ch4 | 9.04E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+00 | 3.6 | 11920.0 |
| 7140. CC6H12+ch3=CC6H11-B+ch4 | 4.61E+00 | 3.1 | 2330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.16E+02 | 3.0 | 25060.0 |
| 7141. CC6H12+ch3=DC6H11-C+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.61E+03 | 3.1 | 23690.0 |
| 7142. CC6H12+ho2=CC6H11-A+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.60E+04 | 2.2 | 4476.0 |
| 7143. CC6H12+ho2=CC6H11-B+h2o2 | 1.81E+03 | 2.5 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.61E+05 | 2.1 | 13100.0 |
| 7144. CC6H12+ho2=DC6H11-C+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.92E+06 | 1.8 | 15130.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7145. CC6H12+ch3o2=CC6H11-A+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.17E+05 | 2.0 | 1456.0 |
| 7146. CC6H12+ch3o2=CC6H11-B+ch3o2h | 1.81E+03 | 2.5 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.35E+05 | 1.9 | 10080.0 |
| 7147. CC6H12+ch3o2=DC6H11-C+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+07 | 1.7 | 12110.0 |
| 7148. CC6H12+ch3o=CC6H11-A+ch3oh | 4.34E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.58E+09 | 0.0 | 9018.0 |
| 7149. CC6H12+ch3o=CC6H11-B+ch3oh | 1.00E+01 | 2.9 | 5231.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E+01 | 2.8 | 25750.0 |
| 7150. CC6H12+ch3o=DC6H11-C+ch3oh | 9.00E+01 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.21E+03 | 2.5 | 27790.0 |
| 7151. DC6H12+h=DC6H11-A+h2 | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.18E+04 | 2.5 | 11040.0 |
| 7152. DC6H12+h=DC6H11-B+h2 | 6.02E+05 | 2.4 | 2583.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.36E+02 | 3.0 | 11350.0 |
| 7153. DC6H12+h=DC6H11-C+h2 | 3.38E+05 | 2.4 | 207.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.42E+06 | 2.1 | 20340.0 |
| 7154. DC6H12+oh=DC6H11-A+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.12E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 7155. DC6H12+oh=DC6H11-B+h2o | 5.73E+10 | 0.5 | 63.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.75E+07 | 1.1 | 23990.0 |
| 7156. DC6H12+oh=DC6H11-C+h2o | 2.76E+04 | 2.6 | -1919.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.57E+06 | 2.4 | 33370.0 |
| 7157. DC6H12+ch3=DC6H11-A+ch4 | 9.04E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.10E+00 | 3.6 | 11910.0 |
| 7158. DC6H12+ch3=DC6H11-B+ch4 | 6.01E-10 | 6.4 | 893.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.17E-12 | 6.9 | 10140.0 |
| 7159. DC6H12+ch3=DC6H11-C+ch4 | 3.69E+00 | 3.3 | 4002.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.26E+03 | 3.0 | 24610.0 |
| 7160. DC6H12+ho2=DC6H11-A+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.68E+04 | 2.2 | 4466.0 |
| 7161. DC6H12+ho2=DC6H11-B+h2o2 | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.65E+01 | 2.8 | 2994.0 |
| 7162. DC6H12+ho2=DC6H11-C+h2o2 | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.62E+06 | 2.0 | 14350.0 |
| 7163. DC6H12+ch3o2=DC6H11-A+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+05 | 2.0 | 1446.0 |
| 7164. DC6H12+ch3o2=DC6H11-B+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.59E+01 | 2.6 | -26.0 |
| 7165. DC6H12+ch3o2=DC6H11-C+ch3o2h | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.38E+06 | 1.8 | 11330.0 |
| 7166. DC6H12+ch3o=DC6H11-A+ch3oh | 4.34E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.72E+09 | 0.0 | 9008.0 |
| 7167. DC6H12+ch3o=DC6H11-B+ch3oh | 2.29E+10 | 0.0 | 2873.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.34E+06 | 0.6 | 9913.0 |
| 7168. DC6H12+ch3o=DC6H11-C+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.52E+02 | 2.7 | 27010.0 |
| 7169. FC6H13O2H=FC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.89E+07 | 1.9 | -6532.0 |
| 7170. GC6H13O2H=GC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.84E+06 | 2.0 | -6922.0 |
| 7171. HC6H13O2H=HC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.30E+06 | 1.9 | -6532.0 |
| 7172. FC6H13O=ch2o+BC5H11 | 1.07E+25 | -3.2 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7173. GC6H13O=ch3hco+TC4H9 | 3.66E+26 | -3.6 | 18480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7174. HC6H13O=ch2o+NEOC5H11 | 1.98E+16 | -0.9 | 23540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7175. AC6H13O2H=AC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.09E+07 | 1.9 | -6512.0 |
| 7176. BC6H13O2H=BC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.38E+07 | 1.9 | -5702.0 |
| 7177. CC6H13O2H=CC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.70E+07 | 1.9 | -6832.0 |
| 7178. DC6H13O2H=DC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.70E+07 | 1.9 | -6832.0 |
| 7179. EC6H13O2H=EC6H13O+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.09E+07 | 1.9 | -6512.0 |
| 7180. AC6H13O=ch2o+Bc5h11 | 3.17E+17 | -1.1 | 22520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7181. BC6H13O=nc3h7+aceton | 1.59E+24 | -3.0 | 17900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7182. CC6H13O=c2h5hco+ic3h7 | 3.30E+19 | -1.6 | 18240.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7183. CC6H13O=c2h5+ic3h7cho | 2.17E+22 | -2.6 | 21330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7184. DC6H13O=ch3hco+IC4H9 | 1.54E+22 | -2.6 | 19720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7185. EC6H13O=ch2o+DC5H11 | 5.86E+20 | -2.2 | 25080.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7186. GC6H12OOH-H=NEOC6H12+ho2 | 2.36E+22 | -2.8 | 23940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.56E+11 | 0.0 | 13460.0 |
| 7187. HC6H12OOH-G=NEOC6H12+ho2 | 2.19E+19 | -2.0 | 21460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.56E+11 | 0.0 | 13460.0 |
| 7188. FC6H12OOH-F=F-FC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7189. FC6H12OOH-G=F-GC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7190. FC6H12OOH-H=F-HC6H12O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7191. GC6H12OOH-H=G-HC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7192. GC6H12OOH-F=F-GC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7193. HC6H12OOH-G=G-HC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7194. HC6H12OOH-F=F-HC6H12O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7195. FC6H12OOH-F=oh+ch2o+AC5H10 | 4.95E+17 | -1.1 | 28430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7196. FC6H12OOH-G=oh+ch2o+BC5H10 | 6.79E+16 | -1.0 | 28070.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7197. GC6H12OOH-F=oh+ch3hco+IC4H8 | 4.75E+21 | -2.4 | 27810.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7198. FC6H12OOH-H=IC4H8+c2h4+ho2 | 1.40E+22 | -3.1 | 25850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7199. AC6H12OOH-B=A-BC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7200. AC6H12OOH-A=A-AC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7201. AC6H12OOH-C=A-CC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7202. AC6H12OOH-D=A-DC6H12O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7203. AC6H12OOH-E=A-EC6H12O+oh | 1.17E+09 | 0.0 | 1800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7204. BC6H12OOH-A=A-BC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7205. BC6H12OOH-C=B-CC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7206. BC6H12OOH-D=B-DC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7207. BC6H12OOH-E=B-EC6H12O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7208. CC6H12OOH-B=B-CC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7209. CC6H12OOH-D=C-DC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7210. CC6H12OOH-A=A-CC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7211. CC6H12OOH-E=C-EC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7212. DC6H12OOH-C=C-DC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7213. DC6H12OOH-E=D-EC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7214. DC6H12OOH-B=B-DC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7215. DC6H12OOH-A=A-DC6H12O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7216. EC6H12OOH-D=D-EC6H12O+oh | 6.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7217. EC6H12OOH-C=C-EC6H12O+oh | 7.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7218. EC6H12OOH-B=B-EC6H12O+oh | 9.38E+09 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7219. EC6H12OOH-A=A-EC6H12O+oh | 1.17E+09 | 0.0 | 1800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7220. AC6H12OOH-B=AC6H12+ho2 | 3.53E+18 | -1.9 | 19760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.94E+11 | 0.0 | 12050.0 |
| 7221. BC6H12OOH-A=AC6H12+ho2 | 2.87E+22 | -2.7 | 21460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.94E+11 | 0.0 | 12050.0 |
| 7222. BC6H12OOH-C=BC6H12+ho2 | 1.48E+21 | -2.5 | 19140.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.73E+11 | 0.0 | 10090.0 |
| 7223. CC6H12OOH-B=BC6H12+ho2 | 2.54E+20 | -2.4 | 19760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.73E+11 | 0.0 | 10090.0 |
| 7224. CC6H12OOH-D=CC6H12+ho2 | 2.39E+20 | -2.4 | 20730.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.62E+11 | 0.0 | 11540.0 |
| 7225. DC6H12OOH-C=CC6H12+ho2 | 2.39E+20 | -2.4 | 20730.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.62E+11 | 0.0 | 11540.0 |
| 7226. DC6H12OOH-E=DC6H12+ho2 | 9.52E+21 | -2.7 | 22840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.56E+11 | 0.0 | 13460.0 |
| 7227. EC6H12OOH-D=DC6H12+ho2 | 7.44E+19 | -2.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.56E+11 | 0.0 | 13460.0 |
| 7228. AC6H12OOH-A=oh+ch2o+c5h10 | 4.30E+15 | -0.6 | 29390.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7229. AC6H12OOH-C=oh+ch2o+C5H10-2 | 5.33E+14 | -0.5 | 29220.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7230. AC6H12OOH-D=ho2+c3h6+c3h6 | 3.24E+17 | -1.4 | 27480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7231. BC6H12OOH-D=oh+aceton+c3h6 | 4.44E+19 | -1.9 | 26850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7232. CC6H12OOH-A=oh+c2h5hco+c3h6 | 1.01E+20 | -1.9 | 28800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7233. CC6H12OOH-E=oh+ic3h7cho+c2h4 | 1.52E+18 | -1.5 | 27560.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7234. DC6H12OOH-B=oh+ch3hco+IC4H8 | 2.62E+16 | -0.8 | 27160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7235. FC6H12OOH-FO2=FC6H12OOH-F+o2 | 5.74E+19 | -1.6 | 35650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7236. FC6H12OOH-GO2=FC6H12OOH-G+o2 | 5.75E+22 | -2.3 | 38010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7237. FC6H12OOH-HO2=FC6H12OOH-H+o2 | 2.09E+20 | -1.6 | 35650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7238. GC6H12OOH-FO2=GC6H12OOH-F+o2 | 1.53E+19 | -1.5 | 35570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7239. GC6H12OOH-HO2=GC6H12OOH-H+o2 | 5.58E+19 | -1.5 | 35570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7240. HC6H12OOH-FO2=HC6H12OOH-F+o2 | 8.71E+19 | -1.6 | 35710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7241. HC6H12OOH-GO2=HC6H12OOH-G+o2 | 6.98E+22 | -2.3 | 38050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.24E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7242. FC6H12OOH-FO2=NEOC6KETFF+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.04E+03 | 1.4 | 43730.0 |
| 7243. FC6H12OOH-GO2=NEOC6KETFG+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.27E+03 | 1.4 | 43790.0 |
| 7244. FC6H12OOH-HO2=NEOC6KETFH+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+02 | 1.4 | 41680.0 |
| 7245. GC6H12OOH-FO2=NEOC6KETGF+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.34E+02 | 1.8 | 42900.0 |
| 7246. GC6H12OOH-HO2=NEOC6KETGH+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.69E+02 | 1.8 | 49020.0 |
| 7247. HC6H12OOH-FO2=NEOC6KETHF+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.62E+02 | 1.5 | 42670.0 |
| 7248. HC6H12OOH-GO2=NEOC6KETHG+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.76E+04 | 1.3 | 48910.0 |
| 7249. AC6H12OOH-AO2=AC6H12OOH-A+o2 | 2.64E+20 | -1.6 | 35640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7250. AC6H12OOH-BO2=AC6H12OOH-B+o2 | 7.48E+24 | -2.5 | 37410.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7251. AC6H12OOH-CO2=AC6H12OOH-C+o2 | 5.21E+22 | -2.2 | 37940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7252. AC6H12OOH-DO2=AC6H12OOH-D+o2 | 5.21E+22 | -2.2 | 37940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7253. AC6H12OOH-EO2=AC6H12OOH-E+o2 | 1.32E+20 | -1.6 | 35640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7254. BC6H12OOH-AO2=BC6H12OOH-A+o2 | 2.95E+20 | -1.6 | 35700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7255. BC6H12OOH-CO2=BC6H12OOH-C+o2 | 1.12E+23 | -2.3 | 37940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7256. BC6H12OOH-DO2=BC6H12OOH-D+o2 | 1.12E+23 | -2.3 | 37940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7257. BC6H12OOH-EO2=BC6H12OOH-E+o2 | 2.95E+20 | -1.6 | 35700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7258. CC6H12OOH-AO2=CC6H12OOH-A+o2 | 6.16E+19 | -1.5 | 35570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7259. CC6H12OOH-DO2=CC6H12OOH-D+o2 | 4.60E+22 | -2.2 | 37910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7260. CC6H12OOH-EO2=CC6H12OOH-E+o2 | 8.16E+19 | -1.5 | 35570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7261. CC6H12OOH-BO2=CC6H12OOH-B+o2 | 1.23E+24 | -2.4 | 37330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7262. DC6H12OOH-AO2=DC6H12OOH-A+o2 | 6.16E+19 | -1.5 | 35570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7263. DC6H12OOH-CO2=DC6H12OOH-C+o2 | 4.60E+22 | -2.2 | 37910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7264. DC6H12OOH-EO2=DC6H12OOH-E+o2 | 8.16E+19 | -1.5 | 35570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7265. DC6H12OOH-BO2=DC6H12OOH-B+o2 | 1.23E+24 | -2.4 | 37330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7266. EC6H12OOH-AO2=EC6H12OOH-A+o2 | 9.98E+19 | -1.6 | 35640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7267. EC6H12OOH-CO2=EC6H12OOH-C+o2 | 1.74E+22 | -2.3 | 37940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7268. EC6H12OOH-DO2=EC6H12OOH-D+o2 | 1.74E+22 | -2.2 | 37940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7269. EC6H12OOH-BO2=EC6H12OOH-B+o2 | 6.26E+23 | -2.5 | 37410.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7270. AC6H12OOH-AO2=IC6KETAA+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+03 | 1.4 | 44430.0 |
| 7271. AC6H12OOH-BO2=IC6KETAB+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.34E+04 | 1.2 | 48720.0 |
| 7272. AC6H12OOH-CO2=IC6KETAC+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.17E+03 | 1.4 | 44470.0 |
| 7273. AC6H12OOH-DO2=IC6KETAD+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.96E+02 | 1.4 | 42420.0 |
| 7274. AC6H12OOH-EO2=IC6KETAE+oh | 3.91E+08 | 0.0 | 22550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.31E+01 | 1.4 | 45580.0 |
| 7275. CC6H12OOH-AO2=IC6KETCA+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+02 | 1.8 | 43880.0 |
| 7276. CC6H12OOH-BO2=IC6KETCB+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.40E+03 | 1.7 | 49190.0 |
| 7277. CC6H12OOH-DO2=IC6KETCD+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.55E+03 | 1.6 | 49090.0 |
| 7278. CC6H12OOH-EO2=IC6KETCE+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+02 | 1.8 | 43880.0 |
| 7279. DC6H12OOH-AO2=IC6KETDA+oh | 1.56E+09 | 0.0 | 16050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+01 | 1.9 | 42100.0 |
| 7280. DC6H12OOH-BO2=IC6KETDB+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.18E+01 | 1.9 | 43910.0 |
| 7281. DC6H12OOH-CO2=IC6KETDC+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E+03 | 1.7 | 49080.0 |
| 7282. DC6H12OOH-EO2=IC6KETDE+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.12E+02 | 1.9 | 50030.0 |
| 7283. EC6H12OOH-AO2=IC6KETEA+oh | 3.91E+08 | 0.0 | 22550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.97E+01 | 1.5 | 45870.0 |
| 7284. EC6H12OOH-BO2=IC6KETEB+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.62E+02 | 1.5 | 42680.0 |
| 7285. EC6H12OOH-CO2=IC6KETEC+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E+03 | 1.5 | 44720.0 |
| 7286. EC6H12OOH-DO2=IC6KETED+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.09E+01 | 0.8 | 48490.0 |
| 7287. F-FC6H12O+oh=IC5H10CHO-BA+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7288. F-GC6H12O+oh=IC5H10CHO-BC+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7289. F-HC6H12O+oh=TC4H8CH2CHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7290. G-HC6H12O+oh=TC4H9CHCHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7291. F-FC6H12O+oh=AC5H9-A1+ch2o+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7292. F-GC6H12O+oh=TC4H8COCH3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7293. F-HC6H12O+oh=IC5H10CHO-BD+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7294. G-HC6H12O+oh=TC4H9COCH2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7295. F-FC6H12O+ho2=IC5H10CHO-BA+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7296. F-GC6H12O+ho2=IC5H10CHO-BC+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7297. F-HC6H12O+ho2=TC4H8CH2CHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7298. G-HC6H12O+ho2=TC4H9CHCHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7299. F-FC6H12O+ho2=AC5H9-A1+ch2o+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7300. F-GC6H12O+ho2=TC4H8COCH3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7301. F-HC6H12O+ho2=IC5H10CHO-BD+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7302. G-HC6H12O+ho2=TC4H9COCH2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7303. A-AC6H12O+oh=C5H10CHO1-2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7304. A-BC6H12O+oh=C5H10CHO2-2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7305. A-CC6H12O+oh=C5H10CHO3-2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7306. A-DC6H12O+oh=C5H10CHO4-2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7307. A-EC6H12O+oh=C5H10CHO5-2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7308. B-CC6H12O+oh=ic3h5cho+c2h5+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7309. B-DC6H12O+oh=IC4H7+ch3hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7310. B-EC6H12O+oh=AC5H9-C+ch2o+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7311. C-DC6H12O+oh=IC3H7COC2H4S+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7312. C-EC6H12O+oh=CC5H10CHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7313. D-EC6H12O+oh=DC5H10CHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7314. A-AC6H12O+oh=C5H91-2+ch2o+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7315. A-BC6H12O+oh=C5H91-2+ch2o+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7316. A-CC6H12O+oh=IC3H6COC2H5+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7317. A-DC6H12O+oh=IC3H6CH2COCH3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7318. A-EC6H12O+oh=AC5H10CHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7319. B-CC6H12O+oh=TC3H6COC2H5+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7320. B-DC6H12O+oh=TC3H6CH2COCH3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7321. B-EC6H12O+oh=BC5H10CHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7322. C-DC6H12O+oh=IC3H7CHCOCH3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7323. C-EC6H12O+oh=IC3H7COC2H4P+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7324. D-EC6H12O+oh=IC4H9COCH2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7325. A-AC6H12O+ho2=C5H10CHO1-2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7326. A-BC6H12O+ho2=C5H10CHO2-2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7327. A-CC6H12O+ho2=C5H10CHO3-2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7328. A-DC6H12O+ho2=C5H10CHO4-2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7329. A-EC6H12O+ho2=C5H10CHO5-2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7330. B-CC6H12O+ho2=ic3h5cho+c2h5+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7331. B-DC6H12O+ho2=IC4H7+ch3hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7332. B-EC6H12O+ho2=AC5H9-C+ch2o+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7333. C-DC6H12O+ho2=IC3H7COC2H4S+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7334. C-EC6H12O+ho2=CC5H10CHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7335. D-EC6H12O+ho2=DC5H10CHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7336. A-AC6H12O+ho2=C5H91-2+ch2o+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7337. A-BC6H12O+ho2=C5H91-2+ch2o+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7338. A-CC6H12O+ho2=IC3H6COC2H5+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7339. A-DC6H12O+ho2=IC3H6CH2COCH3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7340. A-EC6H12O+ho2=AC5H10CHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7341. B-CC6H12O+ho2=TC3H6COC2H5+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7342. B-DC6H12O+ho2=TC3H6CH2COCH3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7343. B-EC6H12O+ho2=BC5H10CHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7344. C-DC6H12O+ho2=IC3H7CHCOCH3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7345. C-EC6H12O+ho2=IC3H7COC2H4P+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7346. D-EC6H12O+ho2=IC4H9COCH2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7347. NEOC6KETFF=ch2o+C4H8CHO2-2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7348. NEOC6KETFG=ch3hco+tc3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7349. NEOC6KETFH=ch2o+TC4H8CHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7350. NEOC6KETGF=ch2o+TC3H6COCH3+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7351. NEOC6KETGH=ch2o+TC4H9CO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7352. NEOC6KETHF=ch2o+TC3H6CH2CHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7353. NEOC6KETHG=TC4H9CHO+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7354. IC6KETAA=ch2o+C4H8CHO-4+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7355. IC6KETAB=c3h7coch3+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7356. IC6KETAC=c2h5hco+CH3CHCHO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7357. IC6KETAD=ch3hco+ic3h6cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7358. IC6KETAE=ch2o+C4H8CHO4-2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7359. IC6KETCA=ch2o+c2h5coc2h4s+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7360. IC6KETCB=aceton+c2h5co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7361. IC6KETCD=ch3hco+ic3h7co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7362. IC6KETCE=ch2o+IC3H7COCH2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7363. IC6KETDA=ch2o+c3h6coch3-2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7364. IC6KETDB=aceton+ch2coch3+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7365. IC6KETDC=ic3h7cho+ch3co+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7366. IC6KETDE=ch2o+IC4H9CO+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7367. IC6KETEA=ch2o+c4h8hco-2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7368. IC6KETEB=aceton+ch2ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7369. IC6KETEC=ic3h7cho+ch2hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7370. IC6KETED=IC4H9CHO+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 39000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7371. NEOC6H12OH=NEOC6H12+oh | 8.74E+14 | -0.6 | 28620.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7372. NEOO2C6H12OH=NEOC6H12OH+o2 | 1.62E+21 | -1.9 | 37740.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7373. NEOO2C6H12OH=TC4H9CHO+ch2o+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7374. AC6H12OH=AC6H12+oh | 1.78E+14 | -0.3 | 28270.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7375. AO2C6H12OH=AC6H12OH+o2 | 1.16E+22 | -2.2 | 37130.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7376. AO2C6H12OH=c3h7coch3+ch2o+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7377. BC6H12OH=BC6H12+oh | 8.40E+15 | -0.8 | 29850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7378. BO2C6H12OH=BC6H12OH+o2 | 1.23E+22 | -2.2 | 37140.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7379. BO2C6H12OH=aceton+c2h5hco+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7380. CC6H12OH=CC6H12+oh | 1.15E+16 | -1.0 | 29470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7381. CO2C6H12OH=CC6H12OH+o2 | 2.56E+21 | -2.0 | 37760.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7382. CO2C6H12OH=ic3h7cho+ch3hco+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7383. DC6H12OH=DC6H12+oh | 5.70E+14 | -0.5 | 27610.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7384. DO2C6H12OH=DC6H12OH+o2 | 1.72E+21 | -1.9 | 37750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7385. DO2C6H12OH=IC4H9CHO+ch2o+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7386. IC5H11CHO-B+oh=IC5H11CO-B+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.18E+12 | 0.0 | 30930.0 |
| 7387. IC5H11CHO-B+oh=IC5H10CHO-BA+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.69E+07 | 1.5 | 28190.0 |
| 7388. IC5H11CHO-B+oh=IC5H10CHO-BC+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.87E+05 | 2.0 | 21840.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7389. IC5H11CHO-B+oh=IC5H10CHO-BD+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.27E+08 | 1.0 | 21000.0 |
| 7390. IC5H11CHO-B+ho2=IC5H11CO-B+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.85E+12 | -0.3 | 12000.0 |
| 7391. IC5H11CHO-B+ho2=IC5H10CHO-BA+h2o2 | 5.52E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.76E+04 | 2.2 | 4432.0 |
| 7392. IC5H11CHO-B+ho2=IC5H10CHO-BC+h2o2 | 2.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.22E+03 | 2.7 | 4322.0 |
| 7393. IC5H11CHO-B+ho2=IC5H10CHO-BD+h2o2 | 2.76E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.88E+04 | 2.2 | 4432.0 |
| 7394. IC5H11CHO-B+ch3o2=IC5H11CO-B+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+13 | -0.5 | 11280.0 |
| 7395. IC5H11CHO-B+ch3o2=IC5H10CHO-BA+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.04E+05 | 2.1 | 3726.0 |
| 7396. IC5H11CHO-B+ch3o2=IC5H10CHO-BC+ch3o2h | 1.77E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.58E+11 | -0.1 | 6744.0 |
| 7397. IC5H11CHO-B+ch3o2=IC5H10CHO-BD+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.59E+13 | -0.5 | 6607.0 |
| 7398. IC5H11CO-B=BC5H11+co | 1.04E+18 | -1.4 | 9078.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 7399. IC5H11CO-B=ic3h6co+c2h5 | 3.78E+21 | -2.2 | 39070.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7400. IC5H10CHO-BA=AC5H10+hco | 5.48E+18 | -1.6 | 25600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7401. IC5H10CHO-BA=ic3h5cho+c2h5 | 1.55E+19 | -1.7 | 26620.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7402. IC5H10CHO-BA=C4H7CHO1-2+ch3 | 1.95E+15 | -0.7 | 25810.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7403. IC5H10CHO-BC=BC5H10+hco | 7.37E+17 | -1.5 | 25700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11200.0 |
| 7404. IC5H10CHO-BC=C4H7CHO2-2+ch3 | 1.13E+16 | 0.4 | 21300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7405. IC5H10CHO-BD=tc3h6cho+c2h4 | 5.81E+18 | -1.9 | 24890.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 11200.0 |
| 7406. NC5H11CHO-2+oh=NC5H11CO-2+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.19E+12 | 0.0 | 30930.0 |
| 7407. NC5H11CHO-2+oh=C5H10CHO1-2+h2o | 6.24E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.36E+06 | 2.0 | 19150.0 |
| 7408. NC5H11CHO-2+oh=C5H10CHO2-2+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+13 | -0.2 | 29920.0 |
| 7409. NC5H11CHO-2+oh=C5H10CHO3-2+h2o | 9.34E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.44E+05 | 2.0 | 21860.0 |
| 7410. NC5H11CHO-2+oh=C5H10CHO4-2+h2o | 9.34E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.44E+05 | 2.0 | 21860.0 |
| 7411. NC5H11CHO-2+oh=C5H10CHO5-2+h2o | 6.24E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.36E+06 | 2.0 | 19150.0 |
| 7412. NC5H11CHO-2+ho2=NC5H11CO-2+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.86E+12 | -0.3 | 12000.0 |
| 7413. NC5H11CHO-2+ho2=C5H10CHO1-2+h2o2 | 5.52E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.16E+04 | 2.2 | 4462.0 |
| 7414. NC5H11CHO-2+ho2=C5H10CHO2-2+h2o2 | 1.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.25E+11 | -0.5 | 11160.0 |
| 7415. NC5H11CHO-2+ho2=C5H10CHO3-2+h2o2 | 2.95E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.77E+03 | 2.6 | 4342.0 |
| 7416. NC5H11CHO-2+ho2=C5H10CHO4-2+h2o2 | 2.95E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.77E+03 | 2.6 | 4342.0 |
| 7417. NC5H11CHO-2+ho2=C5H10CHO5-2+h2o2 | 5.52E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.16E+04 | 2.2 | 4462.0 |
| 7418. NC5H11CHO-2+ch3o2=NC5H11CO-2+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.59E+13 | -0.5 | 11280.0 |
| 7419. NC5H11CHO-2+ch3o2=C5H10CHO1-2+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.21E+13 | -0.5 | 6637.0 |
| 7420. NC5H11CHO-2+ch3o2=C5H10CHO2-2+ch3o2h | 1.00E+10 | 0.0 | 11910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+12 | -0.7 | 10430.0 |
| 7421. NC5H11CHO-2+ch3o2=C5H10CHO3-2+ch3o2h | 3.98E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.81E+11 | -0.1 | 6764.0 |
| 7422. NC5H11CHO-2+ch3o2=C5H10CHO4-2+ch3o2h | 3.98E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.81E+11 | -0.1 | 6764.0 |
| 7423. NC5H11CHO-2+ch3o2=C5H10CHO5-2+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.21E+13 | -0.5 | 6637.0 |
| 7424. NC5H11CO-2=nc3h7+ch3chco | 3.37E+18 | -1.5 | 39750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7425. C5H10CHO1-2=c5h10+hco | 3.45E+15 | -0.8 | 26680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7426. C5H10CHO2-2=ic3h5cho+c2h5 | 1.19E+18 | -1.4 | 33170.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 7427. C5H10CHO3-2=C5H10-2+hco | 4.59E+15 | -1.0 | 26270.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7428. C5H10CHO4-2=c3h6+CH3CHCHO | 6.15E+15 | -1.1 | 23010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 7429. C5H10CHO5-2=c2h4+ic3h6cho | 1.55E+18 | -1.6 | 30430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7430. NEOC5H11CHO+oh=NEOC5H11CO+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.08E+12 | 0.0 | 30920.0 |
| 7431. NEOC5H11CHO+oh=TC4H9CHCHO+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+09 | 1.3 | 28870.0 |
| 7432. NEOC5H11CHO+oh=TC4H8CH2CHO+h2o | 1.29E+10 | 1.1 | 1810.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.47E+09 | 1.1 | 21240.0 |
| 7433. NEOC5H11CHO+ho2=NEOC5H11CO+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+13 | -0.3 | 13670.0 |
| 7434. NEOC5H11CHO+ho2=TC4H9CHCHO+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.27E+13 | -0.6 | 9362.0 |
| 7435. NEOC5H11CHO+ho2=TC4H8CH2CHO+h2o2 | 1.68E+13 | 0.0 | 19400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.91E+13 | -0.3 | 7362.0 |
| 7436. NEOC5H11CHO+ch3o2=NEOC5H11CO+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+13 | -0.5 | 8852.0 |
| 7437. NEOC5H11CHO+ch3o2=TC4H9CHCHO+ch3o2h | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.22E+13 | -0.8 | 8642.0 |
| 7438. NEOC5H11CHO+ch3o2=TC4H8CH2CHO+ch3o2h | 1.68E+13 | 0.0 | 19400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.85E+13 | -0.5 | 6642.0 |
| 7439. NEOC5H11CO=NEOC5H11+co | 2.43E+17 | -1.3 | 13440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 7440. NEOC5H11CO=TC4H9+ch2co | 3.66E+16 | -1.0 | 34870.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 7441. TC4H9CHCHO=IC3H6CHCHO+ch3 | 2.28E+17 | -1.1 | 31770.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7442. TC4H8CH2CHO=IC4H8+ch2hco | 6.61E+19 | -2.2 | 28090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 7443. TC4H8CH2CHO=IC4H7CHO+ch3 | 1.67E+17 | -1.2 | 34510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 7444. IC5H11CHO+oh=IC5H11CO+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.17E+12 | 0.0 | 30920.0 |
| 7445. IC5H11CHO+oh=AC5H10CHO+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.03E+07 | 1.5 | 28200.0 |
| 7446. IC5H11CHO+oh=BC5H10CHO+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.63E+09 | 0.6 | 23130.0 |
| 7447. IC5H11CHO+oh=CC5H10CHO+h2o | 3.62E+07 | 1.6 | -247.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.28E+05 | 2.0 | 21670.0 |
| 7448. IC5H11CHO+oh=DC5H10CHO+h2o | 2.90E+09 | 1.0 | 258.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.66E+10 | 0.7 | 29160.0 |
| 7449. IC5H11CHO+ho2=IC5H11CO+h2o2 | 3.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+13 | -0.3 | 12000.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7450. IC5H11CHO+ho2=AC5H10CHO+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.60E+04 | 2.2 | 4456.0 |
| 7451. IC5H11CHO+ho2=BC5H10CHO+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.59E+09 | 0.2 | 4372.0 |
| 7452. IC5H11CHO+ho2=CC5H10CHO+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.93E+11 | 0.0 | 8152.0 |
| 7453. IC5H11CHO+ho2=DC5H10CHO+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 11510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+06 | 2.0 | 8952.0 |
| 7454. IC5H11CHO+ch3o2=IC5H11CO+ch3o2h | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.39E+13 | -0.5 | 12950.0 |
| 7455. IC5H11CHO+ch3o2=AC5H10CHO+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.30E+05 | 2.0 | 3736.0 |
| 7456. IC5H11CHO+ch3o2=BC5H10CHO+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.95E+02 | 2.6 | 2264.0 |
| 7457. IC5H11CHO+ch3o2=CC5H10CHO+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.78E+03 | 2.5 | 3642.0 |
| 7458. IC5H11CHO+ch3o2=DC5H10CHO+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 11510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.21E+06 | 1.8 | 8232.0 |
| 7459. IC5H11CO=DC5H11+co | 3.42E+16 | -1.0 | 13530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 7460. IC5H11CO=IC4H9+ch2co | 3.03E+16 | -0.9 | 38490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 7461. AC5H10CHO=c3h6+ch2ch2hco | 2.05E+19 | -1.6 | 31560.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 9600.0 |
| 7462. BC5H10CHO=IC4H8+ch2hco | 5.41E+15 | -1.1 | 27480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7463. CC5H10CHO=CC5H10+hco | 3.08E+14 | -0.7 | 26330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 7464. CC5H10CHO=c4h7hco-2+ch3 | 3.34E+14 | -0.6 | 32520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7465. DC5H10CHO=ic3h7+acrol | 1.22E+16 | -0.5 | 33260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7466. TC4H9COCH3+oh=TC4H9COCH2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.15E+13 | -0.7 | 27660.0 |
| 7467. TC4H9COCH3+oh=TC4H8COCH3+h2o | 2.29E+08 | 1.5 | 775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.68E+07 | 1.5 | 20210.0 |
| 7468. TC4H9COCH3+ho2=TC4H9COCH2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.70E+07 | 1.5 | 10500.0 |
| 7469. TC4H9COCH3+ho2=TC4H8COCH3+h2o2 | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.66E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 7470. TC4H9COCH3+ch3o2=TC4H9COCH2+ch3o2h | 3.01E+13 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.85E+16 | -1.2 | 11860.0 |
| 7471. TC4H9COCH3+ch3o2=TC4H8COCH3+ch3o2h | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+05 | 2.0 | 2752.0 |
| 7472. TC4H9COCH2=TC4H9+ch2co | 1.52E+19 | -1.7 | 36770.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 9600.0 |
| 7473. TC4H8COCH3=IC4H8+ch3co | 1.38E+22 | -2.6 | 27450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 7474. IC4H7COCH3+oh=IC4H7COCH2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.01E+13 | -0.7 | 27660.0 |
| 7475. IC4H7COCH3+oh=IC3H5CHCOCH3+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+13 | -0.2 | 28620.0 |
| 7476. IC4H7COCH3+oh=AC3H4CH2COCH3+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.43E+08 | 1.4 | 32460.0 |
| 7477. IC4H7COCH3+ho2=IC4H7COCH2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E+07 | 1.5 | 9691.0 |
| 7478. IC4H7COCH3+ho2=IC3H5CHCOCH3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.03E+13 | -0.5 | 6080.0 |
| 7479. IC4H7COCH3+ho2=AC3H4CH2COCH3+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.96E+06 | 1.7 | 15210.0 |
| 7480. IC4H7COCH3+ch3o2=IC4H7COCH2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.65E+15 | -1.2 | 13660.0 |
| 7481. IC4H7COCH3+ch3o2=IC3H5CHCOCH3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.34E+14 | -0.7 | 11910.0 |
| 7482. IC4H7COCH3+ch3o2=AC3H4CH2COCH3+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.28E+16 | -1.1 | 19950.0 |
| 7483. IC4H7COCH2=IC4H7+ch2co | 1.16E+19 | -1.8 | 39180.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 8600.0 |
| 7484. IC3H5CHCOCH3=c4h6+ch3co | 4.28E+19 | -1.8 | 36750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 13000.0 |
| 7485. AC3H4CH2COCH3=ac3h4+ch2coch3 | 6.84E+21 | -2.5 | 53970.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 9600.0 |
| 7486. CC6H11-D=pc3h4+ic3h7 | 4.79E+12 | 0.3 | 28960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7487. DC6H11-D=ac3h4+ic3h7 | 2.69E+16 | -0.9 | 30540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7488. AC6H11-C+ho2=AC6H11O-C+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.77E+15 | -0.9 | 15560.0 |
| 7489. AC6H11-C+ch3o2=AC6H11O-C+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.73E+17 | -1.5 | 20330.0 |
| 7490. AC6H11-C+c2h5o2=AC6H11O-C+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.13E+14 | -0.6 | 18170.0 |
| 7491. AC6H11-E=AC6H11-A2 | 4.17E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.67E+14 | -0.6 | 39730.0 |
| 7492. CC6H11-B+ho2=CC6H11O-B+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.16E+15 | -1.0 | 17070.0 |
| 7493. CC6H11-B+ch3o2=CC6H11O-B+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.04E+17 | -1.6 | 21830.0 |
| 7494. CC6H11-B+c2h5o2=CC6H11O-B+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.30E+14 | -0.7 | 19670.0 |
| 7495. DC6H11-C+ho2=DC6H11O-C+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.35E+14 | -0.7 | 15410.0 |
| 7496. DC6H11-C+ch3o2=DC6H11O-C+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.23E+16 | -1.3 | 20170.0 |
| 7497. DC6H11-C+c2h5o2=DC6H11O-C+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.42E+13 | -0.4 | 18010.0 |
| 7498. AC6H11-A2=ac3h4+nc3h7 | 1.28E+28 | -4.4 | 72370.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 7499. AC6H11-C=IC5H8+ch3 | 7.17E+20 | -2.5 | 52200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7500. AC6H11-D=c3h6+tc3h5 | 1.33E+22 | -2.9 | 53720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7501. AC6H11-E=c2h4+IC4H7 | 4.96E+23 | -3.5 | 43590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7502. BC6H11-E=c2h4+IC4H7-I1 | 2.01E+17 | -1.3 | 4326.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7503. CC6H11-A=c5h8-13+ch3 | 2.46E+12 | 0.0 | 24210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 |
| 7504. DC6H11-A=c3h6+ac3h5 | 1.23E+18 | -1.5 | 17160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7505. DC6H11-B=IC4H8+c2h3 | 8.22E+12 | -0.3 | 37270.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7506. NEOC6H11=IC4H8+c2h3 | 4.79E+17 | -1.2 | 29640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 7507. IC3H7COC2H5+oh=IC3H6COC2H5+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.12E+07 | 1.5 | 28210.0 |
| 7508. IC3H7COC2H5+oh=TC3H6COC2H5+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.48E+13 | -0.2 | 29920.0 |
| 7509. IC3H7COC2H5+oh=IC3H7COC2H4P+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.04E+11 | 0.0 | 20630.0 |
| 7510. IC3H7COC2H5+oh=IC3H7COC2H4S+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+09 | 1.4 | 28840.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7511. IC3H7COC2H5+ho2=IC3H6COC2H5+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.32E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 7512. IC3H7COC2H5+ho2=TC3H6COC2H5+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.99E+12 | -0.5 | 11160.0 |
| 7513. IC3H7COC2H5+ho2=IC3H7COC2H4P+h2o2 | 1.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.67E+04 | 2.2 | 3472.0 |
| 7514. IC3H7COC2H5+ho2=IC3H7COC2H4S+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+06 | 2.0 | 11320.0 |
| 7515. IC3H7COC2H5+ch3o2=IC3H6COC2H5+ch3o2h | 2.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.94E+04 | 2.0 | 2752.0 |
| 7516. IC3H7COC2H5+ch3o2=TC3H6COC2H5+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 8032.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+06 | 1.9 | 6554.0 |
| 7517. IC3H7COC2H5+ch3o2=IC3H7COC2H4P+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+13 | -0.5 | 6627.0 |
| 7518. IC3H7COC2H5+ch3o2=IC3H7COC2H4S+ch3o2h | 1.77E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.83E+14 | -0.8 | 13740.0 |
| 7519. IC3H6COC2H5=c3h6+c2h5co | 7.39E+18 | -1.6 | 25680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 7520. TC3H6COC2H5=IC3H5COC2H5+h | 4.68E+17 | -0.8 | 43890.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.10E+13 | 0.0 | 1500.0 |
| 7521. IC3H7COC2H4P=ic3h7co+c2h4 | 1.19E+18 | -1.5 | 26110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7522. IC3H7COC2H4S=ch3chco+ic3h7 | 8.31E+16 | -0.7 | 40410.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7523. IC3H5COC2H5+oh=AC3H4COC2H5+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.53E+08 | 1.4 | 32400.0 |
| 7524. IC3H5COC2H5+oh=IC3H5COC2H4P+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.03E+11 | 0.0 | 20620.0 |
| 7525. IC3H5COC2H5+oh=IC3H5COC2H4S+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.21E+08 | 1.4 | 28810.0 |
| 7526. IC3H5COC2H5+oh=aceton+c2h5co | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.04E+10 | 0.1 | 26550.0 |
| 7527. IC3H5COC2H5+ho2=AC3H4COC2H5+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.48E+06 | 1.7 | 15140.0 |
| 7528. IC3H5COC2H5+ho2=IC3H5COC2H4P+h2o2 | 1.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.65E+04 | 2.2 | 3467.0 |
| 7529. IC3H5COC2H5+ho2=IC3H5COC2H4S+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.54E+06 | 2.1 | 11290.0 |
| 7530. IC3H5COC2H5+ch3o2=AC3H4COC2H5+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.50E+15 | -1.1 | 17560.0 |
| 7531. IC3H5COC2H5+ch3o2=IC3H5COC2H4P+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.97E+13 | -0.5 | 6622.0 |
| 7532. IC3H5COC2H5+ch3o2=IC3H5COC2H4S+ch3o2h | 1.77E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.59E+14 | -0.7 | 13710.0 |
| 7533. AC3H4COC2H5=ac3h4+c2h5co | 8.69E+23 | -2.9 | 57300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 9600.0 |
| 7534. IC3H5COC2H4P=c2h4+ic3h5co | 2.87E+16 | -1.2 | 18830.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7535. IC3H5COC2H4S=ch3chco+tc3h5 | 1.42E+21 | -1.9 | 55640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7536. IC3H6CH2COCH3=c3h6+ch2coch3 | 3.61E+17 | -1.2 | 30350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 7537. IC3H7CHCOCH3=IC3H5COCH3+ch3 | 2.90E+16 | -0.9 | 34510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7538. IC3H6CH2COCH3=IC4H8+ch3co | 6.15E+17 | -1.4 | 31780.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 7539. IC3H6CHCOCH3+oh=AC3H5CHCOCH3+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.34E+10 | 1.0 | 41430.0 |
| 7540. IC3H6CHCOCH3+oh=IC3H6CHCOCH2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.12E+07 | -0.5 | 28070.0 |
| 7541. IC3H6CHCOCH3+oh=ic3h7cho+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.84E+06 | 1.0 | 15550.0 |
| 7542. IC3H6CHCOCH3+ho2=AC3H5CHCOCH3+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+07 | 1.7 | 16690.0 |
| 7543. IC3H6CHCOCH3+ho2=IC3H6CHCOCH2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.69E+01 | 1.8 | 10110.0 |
| 7544. IC3H6CHCOCH3+ch3o2=AC3H5CHCOCH3+ch3o2h | 5.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+14 | -1.0 | 12390.0 |
| 7545. IC3H6CHCOCH3+ch3o2=IC3H6CHCOCH2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.81E+09 | -1.0 | 12270.0 |
| 7546. AC3H5CHCOCH3+ho2=ic3h5cho+ch3co+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7547. IC3H6CHCOCH2=IC4H7+ch2co | 1.40E+14 | -1.6 | 50750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 11900.0 |
| 7548. IC4H9COCH3+oh=IC4H9COCH2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.76E+13 | -0.7 | 27670.0 |
| 7549. IC4H9COCH3+oh=IC3H6CH2COCH3+h2o | 1.51E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.78E+09 | 1.0 | 21000.0 |
| 7550. IC4H9COCH3+oh=IC3H7CHCOCH3+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.70E+13 | -0.2 | 28640.0 |
| 7551. IC4H9COCH3+oh=TC3H6CH2COCH3+h2o | 5.73E+10 | 0.5 | 63.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.78E+08 | 1.1 | 23970.0 |
| 7552. IC4H9COCH3+ho2=IC4H9COCH2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.87E+07 | 1.5 | 9702.0 |
| 7553. IC4H9COCH3+ho2=IC3H6CH2COCH3+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.20E+04 | 2.2 | 4442.0 |
| 7554. IC4H9COCH3+ho2=IC3H7CHCOCH3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.39E+13 | -0.6 | 6100.0 |
| 7555. IC4H9COCH3+ho2=TC3H6CH2COCH3+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.16E+10 | 0.3 | 8442.0 |
| 7556. IC4H9COCH3+ch3o2=IC4H9COCH2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.74E+15 | -1.2 | 11870.0 |
| 7557. IC4H9COCH3+ch3o2=IC3H6CH2COCH3+ch3o2h | 6.02E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.70E+13 | -0.5 | 6612.0 |
| 7558. IC4H9COCH3+ch3o2=IC3H7CHCOCH3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.83E+14 | -0.7 | 11930.0 |
| 7559. IC4H9COCH3+ch3o2=TC3H6CH2COCH3+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.73E+02 | 2.6 | 2254.0 |
| 7560. IC4H9COCH2=IC4H9+ch2co | 8.29E+18 | -1.5 | 44360.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 7561. AC6H11O-C=c2h5hco+tc3h5 | 3.24E+22 | -2.6 | 30010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7562. CC6H11O-B=aceton+sc3h5 | 7.18E+17 | -1.2 | 28370.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7563. DC6H11O-C=ic3h7cho+c2h3 | 9.55E+16 | -1.2 | 23360.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 7564. DC6H11O-C=acrol+ic3h7 | 2.42E+16 | -0.8 | 8741.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 7565. IC5H12=ic3h7+c2h5 | 5.85E+25 | -2.6 | 87960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 7566. IC5H12=sc4h9+ch3 | 2.69E+24 | -2.3 | 88980.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 7567. IC5H12=IC4H9+ch3 | 1.46E+22 | -1.8 | 89350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.00E+12 | 0.0 | -596.0 |
| 7568. IC5H12=AC5H11+h | 6.76E+16 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7569. IC5H12=BC5H11+h | 5.92E+18 | -0.9 | 96900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7570. IC5H12=CC5H11+h | 9.88E+17 | -0.7 | 98700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7571. IC5H12=DC5H11+h | 6.76E+16 | -0.4 | 101200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.61E+13 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7572. IC5H12+h=AC5H11+h2 | 1.21E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.58E+02 | 3.2 | 9091.0 |
| 7573. IC5H12+h=BC5H11+h2 | 6.02E+05 | 2.4 | 2583.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.47E+00 | 3.6 | 9246.0 |
| 7574. IC5H12+h=CC5H11+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+01 | 3.4 | 9327.0 |
| 7575. IC5H12+h=DC5H11+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.01E+01 | 3.4 | 8615.0 |
| 7576. IC5H12+o=AC5H11+oh | 2.70E+07 | 2.0 | 5136.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.99E+03 | 2.6 | 6059.0 |
| 7577. IC5H12+o=BC5H11+oh | 3.97E+05 | 2.4 | 1150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.02E-01 | 3.5 | 6401.0 |
| 7578. IC5H12+o=CC5H11+oh | 5.95E+05 | 2.4 | 2846.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.51E+00 | 3.4 | 6290.0 |
| 7579. IC5H12+o=DC5H11+oh | 1.05E+06 | 2.4 | 4766.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.16E+02 | 3.0 | 5689.0 |
| 7580. IC5H12+oh=AC5H11+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.38E+07 | 1.5 | 18820.0 |
| 7581. IC5H12+oh=BC5H11+h2o | 5.73E+10 | 0.5 | 63.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.48E+06 | 1.6 | 21620.0 |
| 7582. IC5H12+oh=CC5H11+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.25E+03 | 2.5 | 19710.0 |
| 7583. IC5H12+oh=DC5H11+h2o | 5.24E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+07 | 1.5 | 18820.0 |
| 7584. IC5H12+ch3=AC5H11+ch4 | 9.07E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.76E-01 | 3.8 | 11030.0 |
| 7585. IC5H12+ch3=BC5H11+ch4 | 6.01E-10 | 6.4 | 893.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.34E-12 | 7.1 | 9096.0 |
| 7586. IC5H12+ch3=CC5H11+ch4 | 8.40E+04 | 2.1 | 7574.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.12E+03 | 2.7 | 13970.0 |
| 7587. IC5H12+ch3=DC5H11+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.80E-02 | 3.8 | 11030.0 |
| 7588. IC5H12+ho2=AC5H11+h2o2 | 4.08E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.04E+00 | 3.5 | 3495.0 |
| 7589. IC5H12+ho2=BC5H11+h2o2 | 6.50E+02 | 3.0 | 12090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.17E-01 | 3.5 | 2756.0 |
| 7590. IC5H12+ho2=CC5H11+h2o2 | 6.32E+01 | 3.4 | 13720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.34E-01 | 3.6 | 2574.0 |
| 7591. IC5H12+ho2=DC5H11+h2o2 | 2.04E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.52E+00 | 3.5 | 3495.0 |
| 7592. IC5H12+ch3o2=AC5H11+ch3o2h | 4.08E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.80E+01 | 3.1 | 1900.0 |
| 7593. IC5H12+ch3o2=BC5H11+ch3o2h | 6.50E+02 | 3.0 | 12090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.78E+01 | 3.0 | 1161.0 |
| 7594. IC5H12+ch3o2=CC5H11+ch3o2h | 6.32E+01 | 3.4 | 13720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.04E+01 | 3.2 | 979.0 |
| 7595. IC5H12+ch3o2=DC5H11+ch3o2h | 2.04E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.90E+01 | 3.1 | 1900.0 |
| 7596. IC5H12+ch3o=AC5H11+ch3oh | 3.20E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 7597. IC5H12+ch3o=BC5H11+ch3oh | 1.90E+10 | 0.0 | 2800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 5200.0 |
| 7598. IC5H12+ch3o=CC5H11+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.91E+09 | 0.0 | 7200.0 |
| 7599. IC5H12+ch3o=DC5H11+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 7600. IC5H12+o2=AC5H11+ho2 | 4.20E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.70E+10 | 0.3 | 451.0 |
| 7601. IC5H12+o2=BC5H11+ho2 | 7.00E+12 | 0.0 | 48000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.94E+07 | 0.8 | -21.0 |
| 7602. IC5H12+o2=CC5H11+ho2 | 1.40E+13 | 0.0 | 50160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+09 | 0.6 | 322.0 |
| 7603. IC5H12+o2=DC5H11+ho2 | 2.10E+13 | 0.0 | 52800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.35E+10 | 0.3 | 451.0 |
| 7604. IC5H12+c2h5=AC5H11+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 7605. IC5H12+c2h5=BC5H11+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 7900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+11 | 0.0 | 21000.0 |
| 7606. IC5H12+c2h5=CC5H11+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12900.0 |
| 7607. IC5H12+c2h5=DC5H11+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.24E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 7608. IC5H12+c2h3=AC5H11+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 7609. IC5H12+c2h3=BC5H11+c2h4 | 2.00E+11 | 0.0 | 14300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+12 | 0.0 | 23000.0 |
| 7610. IC5H12+c2h3=CC5H11+c2h4 | 3.98E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 24200.0 |
| 7611. IC5H12+c2h3=DC5H11+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.51E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 7612. IC5H12+AC5H11=BC5H11+IC5H12 | 2.50E+10 | 0.0 | 7900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 7613. IC5H12+AC5H11=CC5H11+IC5H12 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 7614. IC5H12+AC5H11=DC5H11+IC5H12 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 7615. IC5H12+BC5H11=CC5H11+IC5H12 | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 7900.0 |
| 7616. IC5H12+BC5H11=DC5H11+IC5H12 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 7900.0 |
| 7617. IC5H12+CC5H11=DC5H11+IC5H12 | 7.50E+10 | 0.0 | 12300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 7618. IC5H12+o2cho=AC5H11+ho2cho | 5.40E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.83E+05 | 1.9 | 3976.0 |
| 7619. IC5H12+o2cho=BC5H11+ho2cho | 1.50E+04 | 2.5 | 12260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.22E+03 | 2.5 | 3873.0 |
| 7620. IC5H12+o2cho=CC5H11+ho2cho | 4.90E+04 | 2.5 | 14860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.38E+04 | 2.3 | 4669.0 |
| 7621. IC5H12+o2cho=DC5H11+ho2cho | 2.70E+04 | 2.5 | 16690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.92E+05 | 1.9 | 3976.0 |
| 7622. NEOC5H12+h=NEOC5H11+h2 | 9.79E+05 | 2.8 | 8147.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.42E-01 | 4.0 | 9641.0 |
| 7623. NEOC5H12+o=NEOC5H11+oh | 1.14E+04 | 3.0 | 3123.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.67E-03 | 4.2 | 3205.0 |
| 7624. NEOC5H12+oh=NEOC5H11+h2o | 3.16E+07 | 1.8 | 298.1 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+02 | 2.9 | 16680.0 |
| 7625. NEOC5H12+ch3=NEOC5H11+ch4 | 5.68E-14 | 8.1 | 4150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.34E-17 | 8.8 | 7184.0 |
| 7626. NEOC5H12+ho2=NEOC5H11+h2o2 | 8.16E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.13E-02 | 4.1 | 2654.0 |
| 7627. NEOC5H12+ch3o=NEOC5H11+ch3oh | 6.40E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+10 | 0.0 | 9200.0 |
| 7628. NEOC5H12+o2=NEOC5H11+ho2 | 4.95E+13 | 0.0 | 49000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.17E+08 | 0.9 | -4195.0 |
| 7629. NEOC5H12+c2h5=NEOC5H11+c2h6 | 2.00E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 7630. NEOC5H12+c2h3=NEOC5H11+c2h4 | 2.00E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.60E+12 | 0.0 | 25400.0 |
| 7631. NEOC5H12+o2cho=NEOC5H11+ho2cho | 7.20E+04 | 2.5 | 16680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+03 | 2.5 | 3125.0 |
| 7632. NEOC5H12+ch3o2=NEOC5H11+ch3o2h | 8.16E+01 | 3.6 | 17160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.15E-01 | 3.7 | 1059.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7633. NEOC5H12+CH2CCH2OH=NEOC5H11+c3h5oh | 1.59E+12 | 0.0 | 20500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.97E+11 | -0.2 | 29620.0 |
| 7634. IC4H6OH+NEOC5H12=IC4H7OH+NEOC5H11 | 9.40E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.08E-01 | 3.7 | 7668.0 |
| 7635. IC4H7O+NEOC5H12=IC4H7OH+NEOC5H11 | 5.40E+11 | 0.0 | 4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 9000.0 |
| 7636. tc3h6cho+NEOC5H12=ic3h7cho+NEOC5H11 | 9.40E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.16E+01 | 3.2 | 9819.0 |
| 7637. AC5H11=c3h6+c2h5 | 2.91E+13 | 0.4 | 29710.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+03 | 2.7 | 6850.0 |
| 7638. AC5H11=c4h8+ch3 | 4.84E+11 | 0.8 | 30800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.89E+03 | 2.7 | 6850.0 |
| 7639. AC5H11=AC5H10+h | 1.89E+13 | 0.2 | 34220.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 7640. AC5H11=DC5H11 | 3.00E+11 | 0.0 | 21100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+11 | 0.0 | 21100.0 |
| 7641. BC5H11=IC4H8+ch3 | 5.27E+10 | 1.2 | 30220.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.40E+04 | 2.5 | 6130.0 |
| 7642. BC5H11=AC5H10+h | 3.66E+11 | 0.7 | 37150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+12 | 0.5 | 1230.0 |
| 7643. BC5H11=BC5H10+h | 6.17E+11 | 0.5 | 35580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 7644. CC5H11=C4H8-2+ch3 | 5.28E+10 | 0.9 | 30620.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.89E+03 | 2.7 | 6850.0 |
| 7645. CC5H11=BC5H10+h | 1.48E+12 | 0.3 | 33780.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 7646. CC5H11=CC5H10+h | 6.26E+11 | 0.6 | 38150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 7647. DC5H11=c2h4+ic3h7 | 1.24E+14 | 0.1 | 28960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.80E+03 | 2.5 | 6130.0 |
| 7648. DC5H11=CC5H10+h | 3.66E+12 | 0.2 | 35630.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 7649. AC5H11+o2=AC5H10+ho2 | 2.00E-18 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7650. BC5H11+o2=AC5H10+ho2 | 2.00E-18 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7651. BC5H11+o2=BC5H10+ho2 | 2.00E-18 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7652. CC5H11+o2=BC5H10+ho2 | 2.00E-18 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7653. CC5H11+o2=CC5H10+ho2 | 2.00E-18 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7654. DC5H11+o2=CC5H10+ho2 | 2.00E-18 | 0.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E-19 | 0.0 | 17500.0 |
| 7655. AC5H11+ho2=AC5H11O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.21E+14 | -0.5 | 26440.0 |
| 7656. BC5H11+ho2=BC5H11O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.57E+18 | -1.3 | 28990.0 |
| 7657. CC5H11+ho2=CC5H11O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.98E+17 | -1.1 | 28430.0 |
| 7658. DC5H11+ho2=DC5H11O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+15 | -0.5 | 26440.0 |
| 7659. AC5H11+ch3o2=AC5H11O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.51E+13 | -0.2 | 30680.0 |
| 7660. BC5H11+ch3o2=BC5H11O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.86E+17 | -1.0 | 33230.0 |
| 7661. CC5H11+ch3o2=CC5H11O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+16 | -0.8 | 32670.0 |
| 7662. DC5H11+ch3o2=DC5H11O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.99E+13 | -0.2 | 30680.0 |
| 7663. Bc5h11=C5H10-2+h | 5.00E+12 | 0.0 | 37900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 7664. NEOC5H11=IC4H8+ch3 | 8.47E+17 | -1.1 | 32930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+03 | 2.5 | 8520.0 |
| 7665. NEOC5H11+ho2=NEOC5H11O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.45E+11 | 0.8 | 24900.0 |
| 7666. NEOC5H11+ch3o2=NEOC5H11O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.05E+09 | 1.1 | 29140.0 |
| 7667. AC5H10=IC4H7+ch3 | 1.90E+20 | -1.6 | 75930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.55E+13 | -0.3 | -131.0 |
| 7668. AC5H10=tc3h5+c2h5 | 8.92E+24 | -2.4 | 100500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7669. BC5H10=C4H72-2+ch3 | 1.22E+23 | -1.9 | 101400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7670. BC5H10=IC4H7+ch3 | 2.61E+19 | -1.0 | 79020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7671. CC5H10=Cc4h7-1+ch3 | 1.30E+21 | -1.6 | 76140.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7672. AC5H10+oh=sc4h9+ch2o | 2.00E+10 | 0.0 | 4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 7673. BC5H10+oh=ic3h7+ch3hco | 2.00E+10 | 0.0 | 4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 7674. CC5H10+oh=IC4H9+ch2o | 2.00E+10 | 0.0 | 4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 7675. AC5H10+o=sc4h9+hco | 7.23E+05 | 2.3 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+05 | 2.3 | 80300.0 |
| 7676. AC5H10+o=ic3h7+ch3co | 7.23E+05 | 2.3 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+05 | 2.3 | 80300.0 |
| 7677. AC5H10+o=IC4H9+hco | 7.23E+05 | 2.3 | -1050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+05 | 2.3 | 80300.0 |
| 7678. AC5H10+h=AC5H9-A2+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.95E+06 | 1.9 | 20100.0 |
| 7679. AC5H10+h=AC5H9-C+h2 | 3.38E+05 | 2.4 | 207.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.35E+06 | 2.1 | 20330.0 |
| 7680. AC5H10+h=AC5H9-D+h2 | 6.65E+05 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.04E+04 | 2.5 | 11040.0 |
| 7681. AC5H10+oh=AC5H9-A2+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.43E+08 | 1.4 | 32470.0 |
| 7682. AC5H10+oh=AC5H9-C+h2o | 2.76E+04 | 2.6 | -1919.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.54E+06 | 2.4 | 33360.0 |
| 7683. AC5H10+oh=AC5H9-D+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.04E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 7684. AC5H10+ch3=AC5H9-A2+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.32E+03 | 2.9 | 23770.0 |
| 7685. AC5H10+ch3=AC5H9-C+ch4 | 3.69E+00 | 3.3 | 4002.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+03 | 3.0 | 24600.0 |
| 7686. AC5H10+ch3=AC5H9-D+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.40E-01 | 3.6 | 11910.0 |
| 7687. AC5H10+ho2=AC5H9-A2+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.96E+06 | 1.7 | 15210.0 |
| 7688. AC5H10+ho2=AC5H9-C+h2o2 | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+06 | 2.0 | 14340.0 |
| 7689. AC5H10+ho2=AC5H9-D+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.80E+04 | 2.2 | 4466.0 |
| 7690. AC5H10+ch3o2=AC5H9-A2+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.07E+07 | 1.5 | 12190.0 |
| 7691. AC5H10+ch3o2=AC5H9-C+ch3o2h | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.33E+06 | 1.8 | 11320.0 |
| 7692. AC5H10+ch3o2=AC5H9-D+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.82E+04 | 2.0 | 1446.0 |
| 7693. AC5H10+ch3o=AC5H9-A2+ch3oh | 9.00E+01 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.74E+03 | 2.4 | 27870.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7694. AC5H10+ch3o=AC5H9-C+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.49E+02 | 2.7 | 27000.0 |
| 7695. AC5H10+ch3o=AC5H9-D+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.78E+09 | 0.0 | 9008.0 |
| 7696. BC5H10+h=AC5H9-C+h2 | 3.46E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.27E+07 | 2.0 | 19650.0 |
| 7697. BC5H10+h=CC5H9-B+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.02E+06 | 2.2 | 20400.0 |
| 7698. BC5H10+oh=AC5H9-C+h2o | 6.24E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.94E+08 | 1.5 | 32020.0 |
| 7699. BC5H10+oh=CC5H9-B+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.48E+08 | 1.7 | 32770.0 |
| 7700. BC5H10+ch3=AC5H9-C+ch4 | 4.42E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.25E+03 | 3.0 | 23320.0 |
| 7701. BC5H10+ch3=CC5H9-B+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.34E+03 | 3.2 | 24060.0 |
| 7702. BC5H10+ho2=AC5H9-C+h2o2 | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.82E+07 | 1.8 | 14760.0 |
| 7703. BC5H10+ho2=CC5H9-B+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+07 | 1.9 | 15510.0 |
| 7704. BC5H10+ch3o2=AC5H9-C+ch3o2h | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.80E+07 | 1.6 | 11740.0 |
| 7705. BC5H10+ch3o2=CC5H9-B+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.09E+07 | 1.8 | 12490.0 |
| 7706. BC5H10+ch3o=AC5H9-C+ch3oh | 1.80E+02 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.19E+03 | 2.5 | 27420.0 |
| 7707. BC5H10+ch3o=CC5H9-B+ch3oh | 9.00E+01 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.76E+03 | 2.6 | 28170.0 |
| 7708. CC5H10+h=CC5H9-A+h2 | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.15E+04 | 2.5 | 11030.0 |
| 7709. CC5H10+h=CC5H9-B+h2 | 2.65E+06 | 2.2 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.82E+07 | 2.1 | 22280.0 |
| 7710. CC5H10+oh=CC5H9-A+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.11E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 7711. CC5H10+oh=CC5H9-B+h2o | 6.14E+02 | 3.2 | -3500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.83E+04 | 3.1 | 33940.0 |
| 7712. CC5H10+ch3=CC5H9-A+ch4 | 9.04E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.09E+00 | 3.6 | 11910.0 |
| 7713. CC5H10+ch3=CC5H9-B+ch4 | 4.61E+00 | 3.1 | 2330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.28E+02 | 3.0 | 25090.0 |
| 7714. CC5H10+ho2=CC5H9-A+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.66E+04 | 2.2 | 4461.0 |
| 7715. CC5H10+ho2=CC5H9-B+h2o2 | 1.81E+03 | 2.5 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.20E+05 | 2.1 | 13130.0 |
| 7716. CC5H10+ch3o2=CC5H9-A+ch3o2h | 4.76E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+05 | 2.0 | 1441.0 |
| 7717. CC5H10+ch3o2=CC5H9-B+ch3o2h | 1.81E+03 | 2.5 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.66E+05 | 1.9 | 10110.0 |
| 7718. CC5H10+ch3o=CC5H9-A+ch3oh | 4.34E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.68E+09 | 0.0 | 9003.0 |
| 7719. CC5H10+ch3o=CC5H9-B+ch3oh | 1.00E+01 | 2.9 | 5231.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.31E+01 | 2.8 | 25790.0 |
| 7720. C5H10-2+oh=c2h5+c2h5hco | 1.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 7721. C5H10-2+oh=nc3h7+ch3hco | 2.00E+10 | 0.0 | -4000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 7722. C5H10-2+o=c3h6+ch3hco | 1.00E+10 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 81000.0 |
| 7723. c5h10+o=pc4h9+hco | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7724. c5h10+o=nc3h7+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7725. c5h10+oh=nc3h7+ch3hco | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7726. c5h10+o2=Dc5h9-1+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 49640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.76E+07 | 1.1 | -1072.0 |
| 7727. c5h10+o2=Ec5h9-1+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 52290.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.80E+09 | 0.8 | -932.0 |
| 7728. c5h10+ch3o2=Dc5h9-1+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.10E+02 | 2.9 | 1352.0 |
| 7729. c5h10+ch3o2=Ec5h9-1+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.20E+03 | 2.5 | 1426.0 |
| 7730. c5h10+ch3o=Cc5h9-1+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.77E+01 | 3.1 | 26990.0 |
| 7731. c5h10+ch3o=Dc5h9-1+ch3oh | 1.45E+11 | 0.0 | 4571.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.49E+07 | 0.8 | 9611.0 |
| 7732. c5h10+ch3o=Ec5h9-1+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.45E+08 | 0.5 | 8988.0 |
| 7733. C5H10-2+h=Cc5h9-1+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.56E+06 | 2.1 | 19750.0 |
| 7734. C5H10-2+h=Dc5h9-2+h2 | 3.38E+05 | 2.4 | 207.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.36E+06 | 2.1 | 20330.0 |
| 7735. C5H10-2+h=Ec5h9-2+h2 | 6.65E+05 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.08E+04 | 2.5 | 11030.0 |
| 7736. C5H10-2+o=Cc5h9-1+oh | 4.41E+05 | 2.4 | 3150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.11E+06 | 2.0 | 18310.0 |
| 7737. C5H10-2+o=Dc5h9-2+oh | 9.90E+05 | 2.4 | 1210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.62E+06 | 2.2 | 19240.0 |
| 7738. C5H10-2+o=Ec5h9-2+oh | 9.80E+05 | 2.4 | 4750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+04 | 2.4 | 6931.0 |
| 7739. C5H10-2+oh=Cc5h9-1+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.56E+08 | 1.6 | 32110.0 |
| 7740. C5H10-2+oh=Dc5h9-2+h2o | 2.76E+04 | 2.6 | -1919.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.55E+06 | 2.4 | 33360.0 |
| 7741. C5H10-2+oh=Ec5h9-2+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 7742. C5H10-2+ch3=Cc5h9-1+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.52E+03 | 3.1 | 23410.0 |
| 7743. C5H10-2+ch3=Dc5h9-2+ch4 | 3.69E+00 | 3.3 | 4002.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+03 | 3.0 | 24610.0 |
| 7744. C5H10-2+ch3=Ec5h9-2+ch4 | 4.52E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.48E-01 | 3.6 | 11910.0 |
| 7745. C5H10-2+o2=Cc5h9-1+ho2 | 3.30E+12 | 0.0 | 39900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+12 | -0.1 | -326.0 |
| 7746. C5H10-2+o2=Dc5h9-2+ho2 | 2.20E+12 | 0.0 | 37220.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.16E+11 | 0.1 | -136.0 |
| 7747. C5H10-2+o2=Ec5h9-2+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 52290.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.53E+10 | 0.3 | -916.0 |
| 7748. C5H10-2+ho2=Cc5h9-1+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.53E+06 | 1.8 | 14860.0 |
| 7749. C5H10-2+ho2=Dc5h9-2+h2o2 | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+06 | 2.0 | 14350.0 |
| 7750. C5H10-2+ho2=Ec5h9-2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.84E+04 | 2.2 | 4462.0 |
| 7751. C5H10-2+ch3o2=Cc5h9-1+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.36E+07 | 1.7 | 11840.0 |
| 7752. C5H10-2+ch3o2=Dc5h9-2+ch3o2h | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.33E+06 | 1.8 | 11330.0 |
| 7753. C5H10-2+ch3o2=Ec5h9-2+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.91E+04 | 2.0 | 1442.0 |
| 7754. C5H10-2+ch3o=Cc5h9-1+ch3oh | 9.00E+01 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+03 | 2.5 | 27510.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7755. C5H10-2+ch3o=Dc5h9-2+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.49E+02 | 2.7 | 27010.0 |
| 7756. C5H10-2+ch3o=Ec5h9-2+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 6458.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.85E+09 | 0.0 | 9004.0 |
| 7757. AC5H9-A2+ho2=AC5H9O-A2+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.75E+13 | -0.2 | 13250.0 |
| 7758. AC5H9-A2+ch3o2=AC5H9O-A2+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.68E+15 | -0.7 | 18010.0 |
| 7759. AC5H9-A2+c2h5o2=AC5H9O-A2+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.76E+12 | 0.2 | 15860.0 |
| 7760. AC5H9-C+ho2=AC5H9O-C+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.73E+15 | -1.0 | 15620.0 |
| 7761. AC5H9-C+ch3o2=AC5H9O-C+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.67E+17 | -1.5 | 20380.0 |
| 7762. AC5H9-C+c2h5o2=AC5H9O-C+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+14 | -0.6 | 18220.0 |
| 7763. AC5H9-D=AC5H9-A2 | 1.11E+12 | 0.0 | 31700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.78E+14 | -0.6 | 45030.0 |
| 7764. CC5H9-B+ho2=CC5H9O-B+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.94E+15 | -1.0 | 16870.0 |
| 7765. CC5H9-B+ch3o2=CC5H9O-B+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.87E+17 | -1.6 | 21640.0 |
| 7766. CC5H9-B+c2h5o2=CC5H9O-B+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.88E+14 | -0.7 | 19480.0 |
| 7767. Cc5h9-1+ho2=C5H9O1-3+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.09E+15 | -1.1 | 15720.0 |
| 7768. Cc5h9-1+ch3o2=C5H9O1-3+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.95E+17 | -1.6 | 20480.0 |
| 7769. Cc5h9-1+c2h5o2=C5H9O1-3+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.89E+14 | -0.7 | 18330.0 |
| 7770. Dc5h9-2+ho2=C5H9O2-4+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.03E+15 | -1.2 | 15890.0 |
| 7771. Dc5h9-2+ch3o2=C5H9O2-4+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.86E+17 | -1.8 | 20650.0 |
| 7772. Dc5h9-2+c2h5o2=C5H9O2-4+c2h5o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.49E+14 | -0.9 | 18490.0 |
| 7773. C5H91-2=ac3h4+c2h5 | 6.18E+18 | -1.6 | 32160.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 7774. AC5H9O-A2=C4H71-2+ch2o | 9.21E+17 | -1.4 | 30330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7775. AC5H9O-C=ch3hco+tc3h5 | 3.23E+22 | -2.6 | 30310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7776. CC5H9O-B=aceton+c2h3 | 7.81E+13 | -0.2 | 22330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7777. C5H9O2-4=SC3H5CHO+ch3 | 5.98E+15 | -1.1 | 9941.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 7778. C5H9O2-4=ch3hco+sc3h5 | 1.07E+22 | -2.7 | 29650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 7779. AC5H11O2=AC5H11+o2 | 4.88E+19 | -1.6 | 36040.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7780. BC5H11O2=BC5H11+o2 | 3.22E+24 | -2.5 | 37820.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7781. CC5H11O2=CC5H11+o2 | 4.06E+22 | -2.2 | 38310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7782. DC5H11O2=DC5H11+o2 | 1.94E+20 | -1.6 | 36040.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7783. AC5H11O2+IC5H12=AC5H11O2H+AC5H11 | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7784. BC5H11O2+IC5H12=BC5H11O2H+AC5H11 | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7785. CC5H11O2+IC5H12=CC5H11O2H+AC5H11 | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7786. DC5H11O2+IC5H12=DC5H11O2H+AC5H11 | 1.21E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7787. AC5H11O2+IC5H12=AC5H11O2H+BC5H11 | 2.02E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7788. BC5H11O2+IC5H12=BC5H11O2H+BC5H11 | 2.02E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7789. CC5H11O2+IC5H12=CC5H11O2H+BC5H11 | 2.02E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7790. DC5H11O2+IC5H12=DC5H11O2H+BC5H11 | 2.02E+12 | 0.0 | 16000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7791. AC5H11O2+IC5H12=AC5H11O2H+CC5H11 | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7792. BC5H11O2+IC5H12=BC5H11O2H+CC5H11 | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7793. CC5H11O2+IC5H12=CC5H11O2H+CC5H11 | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7794. DC5H11O2+IC5H12=DC5H11O2H+CC5H11 | 4.03E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7795. AC5H11O2+IC5H12=AC5H11O2H+DC5H11 | 6.05E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7796. BC5H11O2+IC5H12=BC5H11O2H+DC5H11 | 6.05E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7797. CC5H11O2+IC5H12=CC5H11O2H+DC5H11 | 6.05E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7798. DC5H11O2+IC5H12=DC5H11O2H+DC5H11 | 6.05E+12 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7799. AC5H11+AC5H11O2=AC5H11O+AC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.52E+13 | -0.1 | 30160.0 |
| 7800. AC5H11+BC5H11O2=AC5H11O+BC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+13 | -0.1 | 30940.0 |
| 7801. AC5H11+CC5H11O2=AC5H11O+CC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.77E+13 | -0.2 | 29880.0 |
| 7802. AC5H11+DC5H11O2=AC5H11O+DC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.52E+13 | -0.1 | 30160.0 |
| 7803. BC5H11+AC5H11O2=BC5H11O+AC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+17 | -1.0 | 32720.0 |
| 7804. BC5H11+BC5H11O2=BC5H11O+BC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.55E+16 | -1.0 | 33500.0 |
| 7805. BC5H11+CC5H11O2=BC5H11O+CC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+17 | -1.0 | 32440.0 |
| 7806. BC5H11+DC5H11O2=BC5H11O+DC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+17 | -1.0 | 32720.0 |
| 7807. CC5H11+AC5H11O2=CC5H11O+AC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.90E+15 | -0.8 | 32150.0 |
| 7808. CC5H11+BC5H11O2=CC5H11O+BC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.13E+15 | -0.8 | 32930.0 |
| 7809. CC5H11+CC5H11O2=CC5H11O+CC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.58E+15 | -0.8 | 31870.0 |
| 7810. CC5H11+DC5H11O2=CC5H11O+DC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.90E+15 | -0.8 | 32150.0 |
| 7811. DC5H11+AC5H11O2=DC5H11O+AC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.02E+13 | -0.1 | 30160.0 |
| 7812. DC5H11+BC5H11O2=DC5H11O+BC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+13 | -0.1 | 30940.0 |
| 7813. DC5H11+CC5H11O2=DC5H11O+CC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.51E+13 | -0.2 | 29880.0 |
| 7814. DC5H11+DC5H11O2=DC5H11O+DC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.02E+13 | -0.1 | 30160.0 |
| 7815. AC5H11O2+ho2=AC5H11O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.84E+13 | -0.8 | 33620.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7816. AC5H11O2+h2o2=AC5H11O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 7817. AC5H11O2+AC5H11O2=o2+AC5H11O+AC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7818. AC5H11O2+BC5H11O2=o2+AC5H11O+BC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7819. AC5H11O2+CC5H11O2=o2+AC5H11O+CC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7820. AC5H11O2+DC5H11O2=o2+AC5H11O+DC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7821. AC5H11O2+ch3o2=AC5H11O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7822. BC5H11O2+ho2=BC5H11O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.78E+13 | -0.8 | 33610.0 |
| 7823. BC5H11O2+h2o2=BC5H11O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 7824. BC5H11O2+BC5H11O2=o2+BC5H11O+BC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7825. BC5H11O2+CC5H11O2=o2+BC5H11O+CC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7826. BC5H11O2+DC5H11O2=o2+BC5H11O+DC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7827. BC5H11O2+ch3o2=BC5H11O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7828. CC5H11O2+ho2=CC5H11O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.37E+13 | -0.8 | 33630.0 |
| 7829. CC5H11O2+h2o2=CC5H11O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 7830. CC5H11O2+CC5H11O2=o2+CC5H11O+CC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7831. CC5H11O2+DC5H11O2=o2+CC5H11O+DC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7832. CC5H11O2+ch3o2=CC5H11O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7833. DC5H11O2+ho2=DC5H11O2H+o2 | 1.75E+10 | -1.6 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.84E+13 | -2.4 | 33620.0 |
| 7834. DC5H11O2+h2o2=DC5H11O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 7835. DC5H11O2+DC5H11O2=o2+DC5H11O+DC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7836. DC5H11O2+ch3o2=DC5H11O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7837. AC5H11O2=AC5H10OOH-A | 3.75E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.09E+10 | -0.5 | 8950.0 |
| 7838. AC5H11O2=AC5H10OOH-B | 1.00E+11 | 0.0 | 24100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.51E+06 | 0.8 | 10780.0 |
| 7839. AC5H11O2=AC5H10OOH-C | 2.50E+10 | 0.0 | 20850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.89E+09 | -0.1 | 7860.0 |
| 7840. AC5H11O2=AC5H10OOH-D | 4.69E+09 | 0.0 | 22350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+10 | -0.5 | 6900.0 |
| 7841. BC5H11O2=BC5H10OOH-A | 6.00E+11 | 0.0 | 29400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.34E+12 | -0.5 | 13930.0 |
| 7842. BC5H11O2=BC5H10OOH-C | 2.00E+11 | 0.0 | 26850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.99E+10 | -0.2 | 13890.0 |
| 7843. BC5H11O2=BC5H10OOH-D | 3.75E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.34E+10 | -0.5 | 8930.0 |
| 7844. CC5H11O2=CC5H10OOH-A | 7.50E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.96E+11 | -0.5 | 8950.0 |
| 7845. CC5H11O2=CC5H10OOH-B | 1.00E+11 | 0.0 | 24100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.58E+09 | 0.0 | 12940.0 |
| 7846. CC5H11O2=CC5H10OOH-D | 3.00E+11 | 0.0 | 29400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.83E+11 | -0.5 | 13950.0 |
| 7847. DC5H11O2=DC5H10OOH-A | 9.38E+09 | 0.0 | 22350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.42E+10 | -0.5 | 6900.0 |
| 7848. DC5H11O2=DC5H10OOH-B | 1.25E+10 | 0.0 | 19100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.05E+08 | 0.0 | 7970.0 |
| 7849. DC5H11O2=DC5H10OOH-C | 2.00E+11 | 0.0 | 26850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.31E+10 | -0.1 | 13860.0 |
| 7850. AC5H11O2=AC5H10+ho2 | 4.53E+35 | -7.2 | 39490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.45E+27 | -5.4 | 20720.0 |
| 7851. BC5H11O2=AC5H10+ho2 | 1.01E+43 | -9.4 | 41490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.69E+32 | -7.2 | 16620.0 |
| 7852. BC5H11O2=BC5H10+ho2 | 5.04E+38 | -8.1 | 40490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.68E+27 | -5.7 | 18580.0 |
| 7853. CC5H11O2=BC5H10+ho2 | 4.53E+35 | -7.2 | 39490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.98E+25 | -4.9 | 18890.0 |
| 7854. CC5H11O2=CC5H10+ho2 | 5.07E+42 | -9.4 | 41490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.97E+33 | -7.3 | 16520.0 |
| 7855. DC5H11O2=CC5H10+ho2 | 5.04E+38 | -8.1 | 40490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.68E+30 | -6.3 | 20310.0 |
| 7856. NEOC5H11O2=NEOC5H11+o2 | 9.75E+20 | -2.4 | 34530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+17 | -2.1 | 0.0 |
| 7857. NEOC5H11O2+NEOC5H12=NEOC5H11O2H+NEOC5H11 | 2.42E+13 | 0.0 | 20430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.44E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 7858. NEOC5H11+NEOC5H11O2=NEOC5H11O+NEOC5H11O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.47E+09 | 1.1 | 28610.0 |
| 7859. NEOC5H11O2+ho2=NEOC5H11O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.84E+13 | -0.8 | 33620.0 |
| 7860. NEOC5H11O2+h2o2=NEOC5H11O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 7861. NEOC5H11O2+ch3o2=NEOC5H11O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7862. NEOC5H11O2+NEOC5H11O2=o2+NEOC5H11O+NEOC5H11O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7863. NEOC5H11O2H=NEOC5H11O+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.88E+07 | 1.9 | -3022.0 |
| 7864. NEOC5H11O2=NEOC5H10OOH | 1.12E+11 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.14E+10 | -0.5 | 8950.0 |
| 7865. AC5H11O2H=AC5H11O+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.26E+07 | 1.9 | -3002.0 |
| 7866. BC5H11O2H=BC5H11O+oh | 5.95E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.88E+06 | 1.9 | -2172.0 |
| 7867. CC5H11O2H=CC5H11O+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.98E+07 | 1.9 | -4192.0 |
| 7868. DC5H11O2H=DC5H11O+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.26E+07 | 1.9 | -3002.0 |
| 7869. AC5H11O=ch2o+sc4h9 | 2.42E+22 | -2.6 | 24750.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+10 | 0.0 | 11900.0 |
| 7870. BC5H11O=c2h5+aceton | 1.43E+24 | -3.0 | 18050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.50E+10 | 0.0 | 11900.0 |
| 7871. CC5H11O=ch3hco+ic3h7 | 8.73E+23 | -3.0 | 19370.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+10 | 0.0 | 11900.0 |
| 7872. DC5H11O=ch2o+IC4H9 | 2.61E+20 | -2.2 | 25120.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+10 | 0.0 | 11900.0 |
| 7873. NEOC5H11O=ch2o+TC4H9 | 2.65E+25 | -3.2 | 23930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7874. AC5H10OOH-B=A-BC5H10O+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7875. AC5H10OOH-A=A-AC5H10O+oh | 5.00E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7876. AC5H10OOH-C=A-CC5H10O+oh | 5.00E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7877. AC5H10OOH-D=A-DC5H10O+oh | 6.25E+09 | 0.0 | 6000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7878. BC5H10OOH-A=A-BC5H10O+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7879. BC5H10OOH-C=B-CC5H10O+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7880. BC5H10OOH-D=B-DC5H10O+oh | 5.00E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7881. CC5H10OOH-B=B-CC5H10O+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7882. CC5H10OOH-D=C-DC5H10O+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7883. CC5H10OOH-A=A-CC5H10O+oh | 5.00E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7884. DC5H10OOH-C=C-DC5H10O+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 22000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7885. DC5H10OOH-B=B-DC5H10O+oh | 5.00E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7886. DC5H10OOH-A=A-DC5H10O+oh | 6.25E+09 | 0.0 | 6000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7887. AC5H10OOH-B=AC5H10+ho2 | 7.82E+14 | -1.1 | 16450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 7888. BC5H10OOH-A=AC5H10+ho2 | 8.40E+21 | -2.7 | 21150.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11750.0 |
| 7889. BC5H10OOH-C=BC5H10+ho2 | 1.61E+21 | -2.6 | 20700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11750.0 |
| 7890. CC5H10OOH-B=BC5H10+ho2 | 8.48E+19 | -2.3 | 21190.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11750.0 |
| 7891. CC5H10OOH-D=CC5H10+ho2 | 6.72E+20 | -2.6 | 21270.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11750.0 |
| 7892. DC5H10OOH-C=CC5H10+ho2 | 3.47E+18 | -1.9 | 18190.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 7893. AC5H10OOH-C=oh+ch2o+C4H8-2 | 2.72E+14 | -0.5 | 29030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7894. AC5H10OOH-A=oh+ch2o+c4h8 | 4.06E+15 | -0.7 | 29390.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7895. BC5H10OOH-D=oh+aceton+c2h4 | 1.18E+20 | -2.1 | 24210.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7896. CC5H10OOH-A=oh+ch3hco+c3h6 | 8.22E+19 | -1.9 | 26470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7897. DC5H10OOH-B=oh+ch2o+IC4H8 | 7.48E+11 | -0.7 | 30780.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7898. NEOC5H10OOH=NEO-C5H10O+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7899. NEOC5H10OOH=oh+ch2o+IC4H8 | 3.01E+17 | -1.2 | 29950.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7900. NEOC5H10OOH=IC4H7OOH+ch3 | 9.03E+21 | -2.3 | 32830.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 10100.0 |
| 7901. AC5H10OOH-AO2=AC5H10OOH-A+o2 | 3.12E+20 | -1.6 | 35700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7902. AC5H10OOH-BO2=AC5H10OOH-B+o2 | 4.73E+27 | -3.2 | 39640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7903. AC5H10OOH-CO2=AC5H10OOH-C+o2 | 1.37E+23 | -2.3 | 37990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7904. AC5H10OOH-DO2=AC5H10OOH-D+o2 | 3.14E+20 | -1.6 | 35700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7905. BC5H10OOH-AO2=BC5H10OOH-A+o2 | 7.07E+19 | -1.6 | 35690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7906. BC5H10OOH-CO2=BC5H10OOH-C+o2 | 4.42E+22 | -2.2 | 37930.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7907. BC5H10OOH-DO2=BC5H10OOH-D+o2 | 2.82E+20 | -1.6 | 35690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7908. CC5H10OOH-AO2=CC5H10OOH-A+o2 | 1.07E+20 | -1.6 | 35660.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7909. CC5H10OOH-BO2=CC5H10OOH-B+o2 | 1.57E+24 | -2.4 | 37440.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7910. CC5H10OOH-DO2=CC5H10OOH-D+o2 | 2.13E+20 | -1.6 | 35660.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.52E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7911. DC5H10OOH-AO2=DC5H10OOH-A+o2 | 5.23E+19 | -1.6 | 35700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7912. DC5H10OOH-BO2=DC5H10OOH-B+o2 | 2.11E+24 | -2.5 | 37450.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 7913. DC5H10OOH-CO2=DC5H10OOH-C+o2 | 6.90E+22 | -2.3 | 37990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.54E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7914. AC5H10OOH-AO2=IC5KETAA+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+03 | 1.4 | 44430.0 |
| 7915. AC5H10OOH-BO2=IC5KETAB+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.21E+04 | 1.2 | 48730.0 |
| 7916. AC5H10OOH-CO2=IC5KETAC+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.47E+03 | 1.4 | 44460.0 |
| 7917. AC5H10OOH-DO2=IC5KETAD+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.70E+02 | 1.4 | 42380.0 |
| 7918. CC5H10OOH-AO2=IC5KETCA+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 17850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.80E+01 | 1.8 | 43590.0 |
| 7919. CC5H10OOH-BO2=IC5KETCB+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+03 | 1.6 | 48930.0 |
| 7920. CC5H10OOH-DO2=IC5KETCD+oh | 1.00E+11 | 0.0 | 23850.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.04E+02 | 1.8 | 49730.0 |
| 7921. DC5H10OOH-AO2=IC5KETDA+oh | 3.12E+09 | 0.0 | 19350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.60E+02 | 1.5 | 42680.0 |
| 7922. DC5H10OOH-BO2=IC5KETDB+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.36E+03 | 1.5 | 44730.0 |
| 7923. DC5H10OOH-CO2=IC5KETDC+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 26400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.71E+04 | 1.4 | 48910.0 |
| 7924. NEOC5H10OOH-O2=NEOC5H10OOH+o2 | 1.37E+25 | -3.7 | 35700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+17 | -2.1 | 0.0 |
| 7925. NEOC5H10OOH-O2=NEOC5H9Q2 | 7.50E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.76E+11 | -0.5 | 8940.0 |
| 7926. NEOC5H10OOH-O2=NEOC5H9Q2-N | 2.50E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.44E+10 | -0.5 | 10960.0 |
| 7927. IC5KETAA=ch2o+C3H6CHO-3+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7928. IC5KETAB=butanone+hco+oh | 9.50E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7929. IC5KETAC=ch3hco+CH3CHCHO+oh | 1.05E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7930. IC5KETAD=ch2o+ic3h6cho+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7931. IC5KETCA=ch2o+CH3CHCOCH3+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7932. IC5KETCB=aceton+ch3co+oh | 9.50E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7933. IC5KETCD=ch2o+ic3h7co+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7934. IC5KETDA=ch2o+C3H6CHO-2+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7935. IC5KETDB=aceton+ch2hco+oh | 9.50E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7936. IC5KETDC=ic3h7cho+hco+oh | 1.05E+16 | 0.0 | 41600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7937. NEOC5H9Q2=IC4H7OOH+CH2O2H | 7.09E+19 | -1.6 | 35540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7938. NEOC5H9Q2=IC4H6Q2-II+ch3 | 2.19E+16 | -0.7 | 32650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 7939. NEOC5H9Q2-N=NEOC5KET+oh | 9.00E+14 | 0.0 | 1500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.67E+09 | 1.6 | 31880.0 |
| 7940. NEOC5KET=NEOC5KETOX+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.01E+09 | 1.5 | -4125.0 |
| 7941. NEOC5KETOX=tc3h6cho+ch2o | 2.48E+21 | -2.5 | 15830.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 7942. NEOC5KETOX=NEOC5KEJOL | 2.00E+11 | 0.0 | 7600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.54E+09 | 0.4 | 22270.0 |
| 7943. NEOC5KEJOL=IC4H8OH+co | 2.27E+21 | -2.3 | 11020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+11 | 0.0 | 4800.0 |
| 7944. A-AC5H10O+oh=ch2o+C4H71-2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7945. A-BC5H10O+oh=ic3h5cho+ch3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7946. A-CC5H10O+oh=c3h6+ch3co+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7947. A-DC5H10O+oh=c3h6+ch2hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7948. B-CC5H10O+oh=IC3H5COCH3+h+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7949. B-DC5H10O+oh=IC4H8+hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7950. C-DC5H10O+oh=ch2co+ic3h7+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7951. A-AC5H10O+oh=acrol+c2h5+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7952. A-BC5H10O+oh=ch2o+C4H72-2+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7953. A-CC5H10O+oh=tc3h5+ch3hco+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7954. A-DC5H10O+oh=CH3CHCHO+c2h4+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7955. B-CC5H10O+oh=ic3h5cho+ch3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7956. B-DC5H10O+oh=aceton+c2h3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7957. C-DC5H10O+oh=SC3H5CHO+ch3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7958. A-AC5H10O+ho2=ch2o+C4H71-2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7959. A-BC5H10O+ho2=ic3h5cho+ch3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7960. A-CC5H10O+ho2=c3h6+ch3co+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7961. A-DC5H10O+ho2=c3h6+ch2hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7962. B-CC5H10O+ho2=IC3H5COCH3+h+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7963. B-DC5H10O+ho2=IC4H8+hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7964. C-DC5H10O+ho2=ch2co+ic3h7+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7965. A-AC5H10O+ho2=acrol+c2h5+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7966. A-BC5H10O+ho2=ch2o+C4H72-2+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7967. A-CC5H10O+ho2=tc3h5+ch3hco+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7968. A-DC5H10O+ho2=CH3CHCHO+c2h4+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7969. B-CC5H10O+ho2=ic3h5cho+ch3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7970. B-DC5H10O+ho2=aceton+c2h3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7971. C-DC5H10O+ho2=SC3H5CHO+ch3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7972. NEO-C5H10O+oh=TC4H8CHO+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7973. NEO-C5H10O+oh=IC4H7+ch2o+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7974. NEO-C5H10O+ho2=TC4H8CHO+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7975. NEO-C5H10O+ho2=IC4H7+ch2o+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7976. NEO-C5H10O+h=TC4H8CHO+h2 | 3.54E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7977. NEO-C5H10O+h=IC4H7+ch2o+h2 | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7978. NEO-C5H10O=IC4H8+ch2o | 3.80E+15 | 0.0 | 60700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.15E+04 | 2.0 | 59730.0 |
| 7979. AC5H10OH=AC5H10+oh | 7.85E+13 | -0.3 | 28180.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7980. AO2C5H10OH=AC5H10OH+o2 | 2.32E+22 | -2.2 | 37130.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7981. AO2C5H10OH=butanone+ch2o+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7982. BC5H10OH=BC5H10+oh | 1.09E+16 | -0.9 | 29680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7983. BO2C5H10OH=BC5H10OH+o2 | 1.03E+22 | -2.1 | 37110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7984. BO2C5H10OH=aceton+ch3hco+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7985. CC5H10OH=CC5H10+oh | 1.16E+15 | -0.6 | 27900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | -1042.0 |
| 7986. CO2C5H10OH=CC5H10OH+o2 | 8.04E+20 | -1.8 | 37640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7987. CO2C5H10OH=ic3h7cho+ch2o+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 7988. IC3H5COCH3=ic3h5co+ch3 | 2.20E+17 | -0.5 | 75220.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7989. IC3H5COCH3=tc3h5+ch3co | 6.07E+24 | -2.2 | 96960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 7990. IC3H5COCH3+oh=IC3H5COCH2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.44E+13 | -0.7 | 27660.0 |
| 7991. IC3H5COCH3+o=IC3H5COCH2+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 5962.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.40E+13 | -0.7 | 15180.0 |
| 7992. IC3H5COCH3+h=IC3H5COCH2+h2 | 9.30E+12 | 0.0 | 6357.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.71E+14 | -0.7 | 17670.0 |
| 7993. IC3H5COCH3+ch3=IC3H5COCH2+ch4 | 1.62E+11 | 0.0 | 9630.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+14 | -0.7 | 21420.0 |
| 7994. IC3H5COCH3+ho2=IC3H5COCH2+h2o2 | 8.50E+12 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8000.0 |
| 7995. IC3H5COCH3+o2=IC3H5COCH2+ho2 | 6.00E+13 | 0.0 | 46000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 2000.0 |
| 7996. IC3H5COCH2=tc3h5+ch2co | 1.00E+14 | 0.0 | 31000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 7997. IC3H5COCH3+oh=AC3H4COCH3+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.68E+08 | 1.4 | 32460.0 |
| 7998. IC3H5COCH3+o=AC3H4COCH3+oh | 6.03E+10 | 0.7 | 7633.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.25E+11 | 0.1 | 23140.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7999. IC3H5COCH3+h=AC3H4COCH3+h2 | 1.73E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.43E+06 | 1.9 | 20090.0 |
| 8000. IC3H5COCH3+ch3=AC3H4COCH3+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+03 | 2.9 | 23760.0 |
| 8001. IC3H5COCH3+ho2=AC3H4COCH3+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.91E+06 | 1.7 | 15200.0 |
| 8002. IC3H5COCH3+o2=AC3H4COCH3+ho2 | 6.03E+13 | 0.0 | 47590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.17E+13 | -0.3 | 7712.0 |
| 8003. AC3H4COCH3=ac3h4+ch3co | 1.40E+13 | 0.0 | 60000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.68E+00 | 2.9 | 12300.0 |
| 8004. TC4H9CHO+ho2=TC4H9CO+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.85E+12 | -0.3 | 12000.0 |
| 8005. TC4H9CHO+ch3=TC4H9CO+ch4 | 3.98E+12 | 0.0 | 8700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.56E+13 | 0.0 | 25570.0 |
| 8006. TC4H9CHO+o=TC4H9CO+oh | 7.18E+12 | 0.0 | 1389.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.73E+11 | 0.0 | 15680.0 |
| 8007. TC4H9CHO+o2=TC4H9CO+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.09E+11 | 0.3 | -3492.0 |
| 8008. TC4H9CHO+oh=TC4H9CO+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.75E+10 | 0.8 | 31200.0 |
| 8009. TC4H9CO=TC4H9+co | 2.52E+23 | -2.9 | 13490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 8010. TC4H9CHO+oh=TC4H8CHO+h2o | 2.29E+08 | 1.5 | 775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.78E+06 | 1.5 | 20210.0 |
| 8011. TC4H9CHO+h=TC4H8CHO+h2 | 1.81E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+04 | 2.5 | 11040.0 |
| 8012. TC4H9CHO+ho2=TC4H8CHO+h2o2 | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.07E+03 | 2.2 | 3472.0 |
| 8013. TC4H9CHO+ch3=TC4H8CHO+ch4 | 1.36E+00 | 3.6 | 7154.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.79E-01 | 3.6 | 11910.0 |
| 8014. TC4H9CHO+ch3o=TC4H8CHO+ch3oh | 4.82E+11 | 0.0 | 7313.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.82E+09 | 0.0 | 9863.0 |
| 8015. TC4H9CHO+ch3o2=TC4H8CHO+ch3o2h | 3.01E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.49E+04 | 2.0 | 2752.0 |
| 8016. nc4h9hco+oh=C4H8CHO-1+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+09 | 0.9 | 21040.0 |
| 8017. nc4h9hco+oh=C4H8CHO-3+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.84E+05 | 1.9 | 21920.0 |
| 8018. nc4h9hco+oh=C4H8CHO-4+h2o | 4.67E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+09 | 1.3 | 28870.0 |
| 8019. nc4h9hco+ho2=C4H8CHO-1+h2o2 | 2.76E+04 | 2.5 | 16480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.83E+04 | 2.2 | 4471.0 |
| 8020. nc4h9hco+ho2=C4H8CHO-3+h2o2 | 1.48E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.28E+03 | 2.6 | 4399.0 |
| 8021. nc4h9hco+ho2=C4H8CHO-4+h2o2 | 2.95E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.51E+06 | 2.0 | 11350.0 |
| 8022. nc4h9hco+ch3o2=C4H8CHO-1+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.44E+13 | -0.5 | 6646.0 |
| 8023. nc4h9hco+ch3o2=C4H8CHO-3+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.11E+11 | -0.2 | 6821.0 |
| 8024. nc4h9hco+ch3o2=C4H8CHO-4+ch3o2h | 3.98E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+15 | -0.8 | 13770.0 |
| 8025. C4H8CHO-1=c2h4+ch2ch2hco | 5.98E+18 | -1.6 | 30430.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8026. C4H8CHO-3=c4h8+hco | 4.80E+14 | -0.7 | 24350.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8027. C4H8CHO-3=ac3h5hco+ch3 | 3.64E+13 | -0.4 | 30330.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8028. C4H8CHO-4=acrol+c2h5 | 1.86E+18 | -1.3 | 30830.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8029. IC3H7COCH3+oh=IC3H6COCH3+h2o | 1.53E+08 | 1.5 | 8775.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.78E+07 | 1.5 | 28270.0 |
| 8030. IC3H7COCH3+oh=TC3H6COCH3+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.42E+13 | -0.2 | 29920.0 |
| 8031. IC3H7COCH3+oh=IC3H7COCH2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.22E+13 | -0.7 | 27700.0 |
| 8032. IC3H7COCH3+ho2=IC3H6COCH3+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.09E+04 | 2.2 | 3532.0 |
| 8033. IC3H7COCH3+ho2=TC3H6COCH3+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.82E+12 | -0.5 | 11160.0 |
| 8034. IC3H7COCH3+ho2=IC3H7COCH2+h2o2 | 1.38E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.32E+07 | 1.5 | 10540.0 |
| 8035. IC3H7COCH3+ch3o2=IC3H6COCH3+ch3o2h | 2.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.53E+05 | 2.0 | 2812.0 |
| 8036. IC3H7COCH3+ch3o2=TC3H6COCH3+ch3o2h | 3.61E+03 | 2.5 | 8032.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.26E+06 | 1.9 | 6554.0 |
| 8037. IC3H7COCH3+ch3o2=IC3H7COCH2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+16 | -1.2 | 11900.0 |
| 8038. TC3H6COCH3+o2=aceton+ch2co+oh | 3.62E+10 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8039. TC3H6COCH3+o2=IC3H5COCH3+ho2 | 2.72E+11 | 0.0 | 7240.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.63E+09 | 0.2 | 14820.0 |
| 8040. TC3H6COCH3=IC3H5COCH3+h | 1.83E+17 | -0.8 | 43940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+13 | 0.0 | 1560.0 |
| 8041. TC3H6COCH3=ic3h6co+ch3 | 2.44E+15 | -0.4 | 41500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8042. IC3H7COCH2=ic3h7+ch2co | 2.88E+15 | -0.5 | 39940.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 8043. IC3H6COCH3=c3h6+ch3co | 5.49E+18 | -1.6 | 27960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 8044. IC5H8=tc3h5+c2h3 | 3.46E+26 | -2.6 | 116300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8045. IC5H8+o2=IC5H7+ho2 | 3.00E+12 | 0.0 | 39900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.17E+12 | -0.3 | 18.0 |
| 8046. IC5H8+h=IC5H7+h2 | 1.70E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.76E+06 | 1.9 | 20090.0 |
| 8047. IC5H8+o=IC5H7+oh | 6.03E+10 | 0.7 | 7633.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.05E+12 | 0.1 | 23140.0 |
| 8048. IC5H8+oh=IC5H7+h2o | 2.60E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.48E+08 | 1.4 | 32460.0 |
| 8049. IC5H8+ch3=IC5H7+ch4 | 2.21E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.69E+02 | 3.1 | 22870.0 |
| 8050. IC5H8+ho2=IC5H7+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.86E+06 | 1.7 | 15200.0 |
| 8051. IC5H8+ch3o2=IC5H7+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+07 | 1.5 | 11970.0 |
| 8052. c5h8-13+oh=acrol+c2h5 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 8053. c5h8-13+oh=ch3hco+sc3h5 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 8054. IC5H7=ac3h4+c2h3 | 2.85E+15 | -0.2 | 73840.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.89E+03 | 2.5 | 8520.0 |
| 8055. IC5H7+ho2=IC5H7O+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.64E+13 | -0.2 | 12480.0 |
| 8056. IC5H7+ch3o2=IC5H7O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.04E+11 | 0.3 | 15920.0 |
| 8057. IC5H7O=ic4h5+ch2o | 1.58E+21 | -2.2 | 32480.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 8058. IC4H7CHO+oh=IC4H7CO+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.19E+12 | 0.0 | 30930.0 |
| 8059. IC4H7CHO+oh=AC3H4CH2CHO+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.62E+08 | 1.4 | 32400.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 8060. IC4H7CHO+oh=IC3H5CHCHO+h2o | 4.24E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.59E+08 | 1.8 | 34910.0 |
| 8061. IC4H7CHO+ho2=IC4H7CO+h2o2 | 3.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.16E+13 | -0.3 | 12000.0 |
| 8062. IC4H7CHO+ho2=AC3H4CH2CHO+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.64E+06 | 1.7 | 15140.0 |
| 8063. IC4H7CHO+ho2=IC3H5CHCHO+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 12510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.15E+06 | 2.1 | 16260.0 |
| 8064. IC4H7CHO+ch3o2=IC4H7CO+ch3o2h | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.17E+13 | -0.5 | 10450.0 |
| 8065. IC4H7CHO+ch3o2=AC3H4CH2CHO+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.63E+15 | -1.1 | 17560.0 |
| 8066. IC4H7CHO+ch3o2=IC3H5CHCHO+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 15950.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.82E+15 | -0.7 | 18980.0 |
| 8067. IC4H7CO=IC4H7+co | 1.11E+17 | -1.3 | 12230.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 8068. IC4H7CO=tc3h5+ch2co | 1.81E+16 | -1.0 | 47260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 8600.0 |
| 8069. AC3H4CH2CHO=ac3h4+ch2hco | 4.13E+20 | -2.4 | 52470.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8070. IC3H5CHCHO+ho2=ic3h5cho+hco+oh | 8.91E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8071. C4H7CHO1-2+oh=C4H7CO1-2+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.83E+12 | 0.0 | 36810.0 |
| 8072. C4H7CHO1-2+oh=C4H6CHO1-23+h2o | 3.62E+07 | 1.6 | -247.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+09 | 1.4 | 34980.0 |
| 8073. C4H7CHO1-2+oh=C4H6CHO1-24+h2o | 2.06E+07 | 1.7 | 753.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.30E+06 | 1.7 | 20190.0 |
| 8074. C4H7CHO1-2+ho2=C4H7CO1-2+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.03E+13 | -0.3 | 17880.0 |
| 8075. C4H7CHO1-2+ho2=C4H6CHO1-23+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.39E+15 | -0.6 | 21460.0 |
| 8076. C4H7CHO1-2+ho2=C4H6CHO1-24+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.95E+04 | 2.2 | 4462.0 |
| 8077. C4H7CHO1-2+ch3o2=C4H7CO1-2+ch3o2h | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+14 | -0.5 | 18840.0 |
| 8078. C4H7CHO1-2+ch3o2=C4H6CHO1-23+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.03E+15 | -0.7 | 20090.0 |
| 8079. C4H7CHO1-2+ch3o2=C4H6CHO1-24+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.53E+13 | -0.5 | 6627.0 |
| 8080. C4H7CO1-2=C4H71-2+co | 2.12E+22 | -2.5 | 37340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 8081. C4H6CHO1-23=CH2CCHCH3+hco | 8.68E+15 | -0.5 | 55040.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8082. C4H6CHO1-24=c2h4+CH2CCHO | 6.40E+18 | -1.7 | 41090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+11 | 0.0 | 8600.0 |
| 8083. C4H7CHO2-2+oh=C4H7CO2-2+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.59E+12 | 0.0 | 36800.0 |
| 8084. C4H7CHO2-2+oh=C4H6CHO2-21+h2o | 8.42E+11 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.78E+14 | -0.6 | 31980.0 |
| 8085. C4H7CHO2-2+oh=C4H6CHO2-24+h2o | 8.42E+11 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.78E+14 | -0.6 | 31980.0 |
| 8086. C4H7CHO2-2+oh=ch3hco+CH3CHCHO | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.91E+07 | 2.1 | 13480.0 |
| 8087. C4H7CHO2-2+ho2=C4H7CO2-2+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.84E+12 | -0.3 | 17880.0 |
| 8088. C4H7CHO2-2+ho2=C4H6CHO2-21+h2o2 | 1.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+07 | 1.6 | 16800.0 |
| 8089. C4H7CHO2-2+ho2=C4H6CHO2-24+h2o2 | 1.00E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.25E+07 | 1.6 | 16800.0 |
| 8090. C4H7CHO2-2+ho2=ch3hco+acrol+oh | 6.03E+09 | 0.0 | 7949.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8091. C4H7CHO2-2+ch3o2=C4H7CO2-2+ch3o2h | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.13E+14 | -0.5 | 18840.0 |
| 8092. C4H7CHO2-2+ch3o2=C4H6CHO2-21+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+08 | 1.4 | 17070.0 |
| 8093. C4H7CHO2-2+ch3o2=C4H6CHO2-24+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+08 | 1.4 | 17070.0 |
| 8094. C4H7CHO2-2+ch3o2=ch3hco+ch3chco+ch3o | 3.97E+11 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8095. C4H7CO2-2=C4H72-2+co | 4.68E+20 | -3.4 | 41360.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 8096. C4H6CHO2-21=CH2CCHCH3+hco | 4.00E+14 | 0.0 | 13300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.48E+10 | 0.6 | 13820.0 |
| 8097. C4H6CHO2-24=CH2CCHCH3+hco | 2.85E+14 | -1.6 | 60540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 11600.0 |
| 8098. TC4H8CHO=ic3h5cho+ch3 | 1.00E+13 | 0.0 | 26290.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.23E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8099. TC4H8CHO=IC4H8+hco | 8.52E+12 | 0.0 | 20090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 8100. NC4H9CHO-2+oh=NC4H9CO-2+h2o | 3.37E+12 | 0.0 | -616.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.19E+12 | 0.0 | 30930.0 |
| 8101. NC4H9CHO-2+oh=C4H8CHO1-2+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.47E+05 | 2.0 | 19140.0 |
| 8102. NC4H9CHO-2+oh=C4H8CHO2-2+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.21E+13 | -0.2 | 29930.0 |
| 8103. NC4H9CHO-2+oh=C4H8CHO3-2+h2o | 2.90E+09 | 1.0 | 258.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.87E+07 | 1.4 | 22150.0 |
| 8104. NC4H9CHO-2+oh=C4H8CHO4-2+h2o | 3.16E+07 | 1.8 | 934.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.55E+06 | 1.8 | 20370.0 |
| 8105. NC4H9CHO-2+ho2=NC4H9CO-2+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.86E+12 | -0.3 | 12000.0 |
| 8106. NC4H9CHO-2+ho2=C4H8CHO1-2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.93E+04 | 2.2 | 4471.0 |
| 8107. NC4H9CHO-2+ho2=C4H8CHO2-2+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.42E+12 | -0.5 | 11170.0 |
| 8108. NC4H9CHO-2+ho2=C4H8CHO3-2+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.66E+02 | 2.6 | 4342.0 |
| 8109. NC4H9CHO-2+ho2=C4H8CHO4-2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.93E+04 | 2.2 | 4471.0 |
| 8110. NC4H9CHO-2+ch3o2=NC4H9CO-2+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.59E+13 | -0.5 | 11280.0 |
| 8111. NC4H9CHO-2+ch3o2=C4H8CHO1-2+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+05 | 2.0 | 3751.0 |
| 8112. NC4H9CHO-2+ch3o2=C4H8CHO2-2+ch3o2h | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | -0.7 | 10450.0 |
| 8113. NC4H9CHO-2+ch3o2=C4H8CHO3-2+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.33E+03 | 2.5 | 3622.0 |
| 8114. NC4H9CHO-2+ch3o2=C4H8CHO4-2+ch3o2h | 2.38E+04 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+05 | 2.0 | 3751.0 |
| 8115. NC4H9CO-2=sc4h9+co | 1.53E+13 | -0.1 | 10650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 8116. C4H8CHO1-2=acrol+c2h5 | 8.94E+16 | -1.2 | 26200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8117. C4H8CHO1-2=c4h8+hco | 4.04E+16 | -1.2 | 26670.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8118. C4H8CHO2-2=ic3h5cho+ch3 | 2.03E+14 | -0.5 | 34550.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8119. C4H8CHO3-2=C4H8-2+hco | 2.80E+15 | -1.1 | 21570.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 8120. C4H8CHO4-2=CH3CHCHO+c2h4 | 4.39E+16 | -1.5 | 26490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.00E+10 | 0.0 | 11300.0 |

```
8121. IC4H9CHO+oh=IC4H9CO+h2o                    2.69E+10    0.8     -340.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.62E+10    0.8    31180.0
8122. IC4H9CHO+oh=TC3H6CH2CHO+h2o                2.70E+09    1.0     -149.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.04E+07    1.6    23790.0
8123. IC4H9CHO+oh=IC3H6CH2CHO+h2o                3.16E+07    1.8      934.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.17E+06    1.8    20330.0
8124. IC4H9CHO+oh=IC3H7CHCHO+h2o                 2.90E+09    1.0      258.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.23E+10    0.7    29150.0
8125. IC4H9CHO+ho2=IC4H9CO+h2o2                  3.00E+12    0.0    11920.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.08E+13   -0.3    11990.0
8126. IC4H9CHO+ho2=TC3H6CH2CHO+h2o2              3.61E+03    2.5    10530.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.28E+01    2.8     3004.0
8127. IC4H9CHO+ho2=IC3H6CH2CHO+h2o2              4.76E+04    2.5    16490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.63E+04    2.2     4430.0
8128. IC4H9CHO+ho2=IC3H7CHCHO+h2o2               9.64E+03    2.6    11510.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.43E+06    2.0     8942.0
8129. IC4H9CHO+ch3o2=IC4H9CO+ch3o2h              2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.12E+13   -0.5    12940.0
8130. IC4H9CHO+ch3o2=TC3H6CH2CHO+ch3o2h          3.61E+03    2.5    10530.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.40E+02    2.6     2284.0
8131. IC4H9CHO+ch3o2=IC3H6CH2CHO+ch3o2h          4.76E+04    2.5    16490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.90E+05    2.1     3710.0
8132. IC4H9CHO+ch3o2=IC3H7CHCHO+ch3o2h           9.64E+03    2.6    11510.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.86E+06    1.8     8222.0
8133. IC4H9CO=IC4H9+co                           4.42E+16   -1.0    13350.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+11    0.0     4810.0
8134. IC4H9CO=ic3h7+ch2co                        6.78E+12    0.2    36340.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0     9200.0
8135. TC3H6CH2CHO=IC4H8+hco                      1.39E+14   -0.6    23240.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0     6000.0
8136. IC3H6CH2CHO=c3h6+ch2hco                    1.57E+16   -1.1    25870.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.00E+10    0.0    10600.0
8137. IC3H6CH2CHO=ac3h5hco+ch3                   1.92E+15   -0.7    32870.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.00E+10    0.0    10600.0
8138. IC3H7CHCHO=SC3H5CHO+ch3                    4.40E+15   -0.6    32150.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.23E+11    0.0    10600.0
8139. c4h7hco-1+oh=C4H6CHO1-43+h2o               2.08E+06    2.0     -298.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.19E+08    1.7    34980.0
8140. c4h7hco-1+oh=C4H6CHO1-44+h2o               4.67E+07    1.6      -35.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+09    1.3    28900.0
8141. c4h7hco-1+oh=ch3hco+ch2ch2hco              1.00E+11    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.34E+06    1.0    19260.0
8142. c4h7hco-1+ho2=C4H6CHO1-43+h2o2             9.64E+03    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.26E+06    2.0    17730.0
8143. c4h7hco-1+ho2=C4H6CHO1-44+h2o2             1.48E+04    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.82E+06    2.0    11380.0
8144. c4h7hco-1+ch3o2=c4h7co-1+ch3o2h            2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.86E+13   -0.5    12970.0
8145. c4h7hco-1+ch3o2=C4H6CHO1-43+ch3o2h         1.99E+12    0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.77E+15   -0.8    20150.0
8146. c4h7hco-1+ch3o2=C4H6CHO1-44+ch3o2h         1.99E+12    0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.56E+15   -0.8    13800.0
8147. C4H6CHO1-43=c4h6+hco                       4.83E+15   -0.8    33540.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0     7800.0
8148. C4H6CHO1-44=acrol+c2h3                     2.12E+14   -0.4    37160.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0     7800.0
8149. c4h7hco-2+oh=C4H6CHO2-11+h2o               2.08E+06    2.0     -298.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.59E+07    1.8    34910.0
8150. c4h7hco-2+oh=C4H6CHO1-43+h2o               3.12E+06    2.0     -298.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.54E+08    1.7    33100.0
8151. c4h7hco-2+oh=c2h5hco+ch2hco                1.00E+11    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.06E+09    0.5    24280.0
8152. c4h7hco-2+ho2=C4H6CHO1-43+h2o2             9.64E+03    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.82E+06    1.9    15850.0
8153. c4h7hco-2+ho2=C4H6CHO2-11+h2o2             1.48E+04    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.20E+06    2.1    17660.0
8154. c4h7hco-2+ch3o2=c4h7co-2+ch3o2h            2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.44E+13   -0.5    12960.0
8155. c4h7hco-2+ch3o2=C4H6CHO1-43+ch3o2h         1.99E+12    0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.40E+15   -0.8    18270.0
8156. c4h7hco-2+ch3o2=C4H6CHO2-11+ch3o2h         1.99E+12    0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.77E+15   -0.7    20080.0
8157. C4H6CHO2-11+ho2=SC3H5CHO+hco+oh            8.91E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00    0.0        0.0
8158. IC3H6CHCHO+oh=IC3H6CHCO+h2o                3.37E+12    0.0     -616.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.78E+12    0.0    36810.0
8159. IC3H6CHCHO+oh=AC3H5CHCHO+h2o               1.53E+08    1.5     8775.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.91E+10    1.0    41490.0
8160. IC3H6CHCHO+oh=tc3h6cho+ch2o                1.00E+11    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.39E+11    0.1    16080.0
8161. O2C4H8CHO=TC4H8CHO+o2                      1.52E+19   -1.4    34510.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.00E+12    0.0        0.0
8162. O2C4H8CHO=O2HC4H8CO                        2.16E+11    0.0    15360.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.17E+13   -0.7    14880.0
8163. O2HC4H8CO=IC4H8O2H-T+co                    3.30E+22   -2.7    11760.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+11    0.0     4809.0
8164. IC4H6Q2-II=ac3h4+ch2o+ho2+oh               1.00E+16    0.0    43000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00    0.0        0.0
8165. IC4H7-I1=pc3h4+ch3                         2.10E+12    0.1    29950.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0     9200.0
8166. ic4h5=c2h3+c2h2                            3.98E+11    0.7    42260.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.76E+09    0.8     4450.0
8167. c4h10(+M)=c2h5+c2h5(+M)                    2.72E+15    0.0    75610.0
    Low pressure limit:  0.47200E+19  0.00000E+00  0.49576E+05
    TROE centering:      0.72000E+00  0.15000E+04  0.10000E-09  0.10000E+11
8168. c4h10(+M)=nc3h7+ch3(+M)                    4.28E+14    0.0    69900.0
    Low pressure limit:  0.53400E+18  0.00000E+00  0.42959E+05
    TROE centering:      0.72000E+00  0.15000E+04  0.10000E-09  0.10000E+11
8169. c4h10+c2h5o=pc4h9+c2h5oh                   3.00E+11    0.0     7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+10    0.0     9000.0
8170. c4h10+c2h5o=sc4h9+c2h5oh                   6.00E+11    0.0     7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+10    0.0     9000.0
8171. c4h10+pc4h9=sc4h9+c4h10                    1.00E+11    0.0    10400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+11    0.0    12300.0
8172. c4h10+ch3co3=pc4h9+ch3co3h                 1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8173. c4h10+ch3co3=sc4h9+ch3co3h                 1.12E+13    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8174. c4h10+o2cho=pc4h9+ho2cho                   1.68E+13    0.0    20440.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.68E+00    3.0     2505.0
8175. c4h10+o2cho=sc4h9+ho2cho                   1.12E+13    0.0    17690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.60E+03    2.1     4266.0
8176. ch3o2+c4h10=ch3o2h+pc4h9                   1.39E+00    4.0    18280.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.68E+00    3.5     3016.0
8177. ch3o2+c4h10=ch3o2h+sc4h9                   2.04E+01    3.6    14810.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.68E+00    3.4     2050.0
8178. c2h5o2+c4h10=c2h5o2h+pc4h9                 4.08E+01    3.6    17160.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.94E+01    3.1     1899.0
8179. c2h5o2+c4h10=c2h5o2h+sc4h9                 1.26E+02    3.4    13720.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.04E+01    3.2      967.0
8180. nc3h7o2+c4h10=nc3h7o2h+pc4h9               1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
```

```
8181. nc3h7o2+c4h10=nc3h7o2h+sc4h9                1.12E+13    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8182. ic3h7o2+c4h10=ic3h7o2h+pc4h9                1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8183. ic3h7o2+c4h10=ic3h7o2h+sc4h9                1.12E+13    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8184. IC4H10(+M)=ch3+ic3h7(+M)                    4.83E+16    0.0    79900.0
    Low pressure limit:  0.24100E+20  0.00000E+00  0.52576E+05
    TROE centering:      0.25000E+00  0.75000E+03  0.10000E-09  0.10000E+11
8185. IC4H10=TC4H9+h                              2.51E+98  -23.8   145300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.13E+93  -22.9    48390.0
8186. IC4H10=IC4H9+h                              9.85E+95  -23.1   147600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.25E+92  -22.8    46360.0
8187. IC4H10+h=TC4H9+h2                           6.02E+05    2.4     2583.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.08E+00    3.6     9213.0
8188. IC4H10+h=IC4H9+h2                           1.81E+06    2.5     6756.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.65E+02    3.2     9096.0
8189. IC4H10+ch3=TC4H9+ch4                        9.04E-01    3.5     4598.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.48E-03    4.2    12770.0
8190. IC4H10+ch3=IC4H9+ch4                        1.36E+00    3.6     7154.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.13E-01    3.8    11030.0
8191. IC4H10+oh=TC4H9+h2o                         2.92E+04    2.5    -1659.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.58E-01    3.6    19860.0
8192. IC4H10+oh=IC4H9+h2o                         6.65E+04    2.7     -168.9
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.44E+01    3.2    17060.0
8193. IC4H10+c2h5=IC4H9+c2h6                      1.51E+12    0.0    10400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.20E+11    0.0    12300.0
8194. IC4H10+c2h5=TC4H9+c2h6                      1.00E+11    0.0     7900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.00E+11    0.0    21000.0
8195. IC4H10+ho2=IC4H9+h2o2                       6.12E+01    3.6    17160.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.23E+00    3.5     3500.0
8196. IC4H10+ho2=TC4H9+h2o2                       4.33E+02    3.0    12090.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.51E-01    3.5     2723.0
8197. IC4H10+o=TC4H9+oh                           1.97E+05    2.4     1150.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.84E-01    3.6     6368.0
8198. IC4H10+o=IC4H9+oh                           4.05E+07    2.0     5136.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.92E+03    2.6     6064.0
8199. IC4H10+ch3o=IC4H9+ch3oh                     4.80E+11    0.0     7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            9.40E+08    0.4     9567.0
8200. IC4H10+ch3o=TC4H9+ch3oh                     1.90E+10    0.0     2800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.34E+05    1.0     9657.0
8201. IC4H10+o2=IC4H9+ho2                         9.00E+13    0.0    52290.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.31E+10    0.3      -59.0
8202. IC4H10+o2=TC4H9+ho2                         1.00E+13    0.0    48200.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            9.44E+07    0.9      141.0
8203. IC4H10+ch3o2=IC4H9+ch3o2h                   2.08E+00    4.0    18280.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.13E+00    3.5     3026.0
8204. IC4H10+c2h5o2=IC4H9+c2h5o2h                 2.55E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.62E+13   -0.5     5208.0
8205. IC4H10+ch3co3=IC4H9+ch3co3h                 2.55E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.15E+12    0.0     9570.0
8206. IC4H10+nc3h7o2=IC4H9+nc3h7o2h               2.55E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.68E+13   -0.5     5000.0
8207. IC4H10+ic3h7o2=IC4H9+ic3h7o2h               2.55E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.69E+13   -0.5     5000.0
8208. IC4H10+IC4H9O2=IC4H9+IC4H9O2H               2.55E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.68E+13   -0.5     5010.0
8209. IC4H10+TC4H9O2=IC4H9+TC4H9O2H               2.55E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.68E+13   -0.5     5010.0
8210. IC4H10+o2cho=IC4H9+ho2cho                   2.52E+13    0.0    20440.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.01E+00    3.1     2375.0
8211. IC4H10+o2cho=TC4H9+ho2cho                   2.80E+12    0.0    16010.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.89E+01    2.7     4678.0
8212. IC4H10+c4h9qjB=IC4H9+SC4H9O2H               2.25E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8213. IC4H10+c4h9qjB=TC4H9+SC4H9O2H               2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8214. IC4H10+c4h9qjA=IC4H9+PC4H9O2H               2.25E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8215. IC4H10+c4h9qjA=TC4H9+PC4H9O2H               2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8216. IC4H10+ch3o2=TC4H9+ch3o2h                   1.37E+02    3.1    13190.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.77E+00    3.2     2228.0
8217. IC4H10+c2h5o2=TC4H9+c2h5o2h                 2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0    10000.0
8218. IC4H10+ch3co3=TC4H9+ch3co3h                 2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0    10000.0
8219. IC4H10+nc3h7o2=TC4H9+nc3h7o2h               2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0    10000.0
8220. IC4H10+ic3h7o2=TC4H9+ic3h7o2h               2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0    10000.0
8221. IC4H10+IC4H9O2=TC4H9+IC4H9O2H               2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0    10000.0
8222. IC4H10+TC4H9O2=TC4H9+TC4H9O2H               2.80E+12    0.0    16000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0    10000.0
8223. IC4H10+IC4H9=TC4H9+IC4H10                   2.50E+10    0.0     7900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.25E+11    0.0    12300.0
8224. c4h9qjA+c3h8=PC4H9O2H+nc3h7                 1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8225. c4h9qjA+c3h8=PC4H9O2H+ic3h7                 2.00E+12    0.0    17000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8226. c4h9qjA+c4h10=PC4H9O2H+pc4h9                1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8227. c4h9qjA+c4h10=PC4H9O2H+sc4h9                1.12E+13    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8228. c4h9qjB+c3h8=SC4H9O2H+nc3h7                 1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8229. c4h9qjB+c3h8=SC4H9O2H+ic3h7                 2.00E+12    0.0    17000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8230. c4h9qjB+c4h10=SC4H9O2H+pc4h9                1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8231. c4h9qjB+c4h10=SC4H9O2H+sc4h9                1.12E+13    0.0    17700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+11    0.0     6500.0
8232. sc4h9=C4H8-2+h                              2.84E+11    0.3    35520.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.50E+11    0.5     2620.0
8233. sc4h9+o2=C4H8-2+ho2                         2.00E-18    0.0     5000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.00E-19    0.0    17500.0
8234. c4h9qjB+ch2o=SC4H9O2H+hco                   5.60E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.00E+11    0.0    10000.0
8235. c4h9qjB+ch3hco=SC4H9O2H+ch3co               2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+12    0.0    10000.0
8236. c4h9qjB+ho2=SC4H9O2H+o2                     1.75E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.86E+13   -0.8    33620.0
8237. ic3h7o2+pc4h9=ic3h7o+PC4H9O                 7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.28E+13    0.1    27480.0
8238. ic3h7o2+sc4h9=ic3h7o+SC4H9O                 7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.94E+15   -0.4    29190.0
8239. nc3h7o2+pc4h9=nc3h7o+PC4H9O                 7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.06E+15   -0.6    27680.0
8240. nc3h7o2+sc4h9=nc3h7o+SC4H9O                 7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.82E+17   -1.1    29390.0
8241. c4h9qjB+c4h9qjB=o2+SC4H9O+SC4H9O            1.40E+16   -1.6     1860.0
```

```
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8242. c4h9qjB+nc3h7o2=SC4H9O+nc3h7o+o2          1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8243. c4h9qjB+ic3h7o2=SC4H9O+ic3h7o+o2          1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8244. c4h9qjB+c2h5o2=SC4H9O+c2h5o+o2            1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8245. c4h9qjB+ch3o2=SC4H9O+ch3o+o2              1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8246. c4h9qjB+ch3co3=SC4H9O+ch3co2+o2           1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8247. c4h9qjA+ho2=PC4H9O+oh+o2                  1.40E-14   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8248. c4h9qjB+ho2=SC4H9O+oh+o2                  1.40E-14   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8249. h2+c4h9qjA=h+PC4H9O2H                     3.01E+13    0.0    26030.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.80E+13    0.0     7950.0
8250. h2+c4h9qjB=h+SC4H9O2H                     3.01E+13    0.0    26030.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.80E+13    0.0     7950.0
8251. c2h6+c4h9qjA=c2h5+PC4H9O2H                1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+11    0.0     6500.0
8252. c2h6+c4h9qjB=c2h5+SC4H9O2H                1.70E+13    0.0    20460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+11    0.0     6500.0
8253. c4h9qjA+c2h5hco=PC4H9O2H+c2h5co           2.00E+11    0.0     9500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+09    0.0    10000.0
8254. c4h9qjB+c2h5hco=SC4H9O2H+c2h5co           2.00E+11    0.0     9500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+09    0.0    10000.0
8255. c4h9qjB+ch3=SC4H9O+ch3o                   7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.18E+13    0.1    26110.0
8256. c4h9qjB+c2h5=SC4H9O+c2h5o                 7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.67E+15   -0.5    28520.0
8257. c4h9qjB+ic3h7=SC4H9O+ic3h7o               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.85E+15   -0.4    29190.0
8258. c4h9qjB+nc3h7=SC4H9O+nc3h7o               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.69E+15   -0.5    27190.0
8259. c4h9qjB+pc4h9=SC4H9O+PC4H9O               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.34E+15   -0.6    26870.0
8260. c4h9qjB+sc4h9=SC4H9O+SC4H9O               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.05E+17   -1.1    28580.0
8261. c4h9qjB+ac3h5=SC4H9O+c3h5o                7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.36E+11    0.2    13530.0
8262. c4h9qjA+ch2o=PC4H9O2H+hco                 5.60E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          8.00E+11    0.0    10000.0
8263. c4h9qjA+ch3hco=PC4H9O2H+ch3co             2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+12    0.0    10000.0
8264. c4h9qjA+ho2=PC4H9O2H+o2                   1.75E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.36E+13   -0.8    33630.0
8265. c3h6+c4h9qjA=ac3h5+PC4H9O2H               3.24E+11    0.0    14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.00E+10    0.0    15000.0
8266. c3h6+c4h9qjB=ac3h5+SC4H9O2H               3.24E+11    0.0    14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.00E+10    0.0    15000.0
8267. c2h4+c4h9qjA=c2h3+PC4H9O2H                1.13E+13    0.0    30430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.00E+12    0.0    11500.0
8268. c2h4+c4h9qjB=c2h3+SC4H9O2H                1.13E+13    0.0    30430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.00E+12    0.0    11500.0
8269. ch3oh+c4h9qjA=ch2oh+PC4H9O2H              6.30E+12    0.0    19360.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+09    0.0    10000.0
8270. ch3oh+c4h9qjB=ch2oh+SC4H9O2H              6.30E+12    0.0    19360.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+09    0.0    10000.0
8271. acrol+c4h9qjA=c2h3co+PC4H9O2H             2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+12    0.0    10000.0
8272. acrol+c4h9qjB=c2h3co+SC4H9O2H             2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+12    0.0    10000.0
8273. ch4+c4h9qjA=ch3+PC4H9O2H                  1.12E+13    0.0    24640.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.43E+11    0.0     5500.0
8274. ch4+c4h9qjB=ch3+SC4H9O2H                  1.12E+13    0.0    24640.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.43E+11    0.0     5500.0
8275. Cc4h7-1+c4h9qjA=C4H7O+PC4H9O              7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.19E+14   -0.8    16100.0
8276. Cc4h7-1+c4h9qjB=C4H7O+SC4H9O              7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.25E+14   -0.7    15580.0
8277. h2o2+c4h9qjA=ho2+PC4H9O2H                 2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.40E+12    0.0    10000.0
8278. h2o2+c4h9qjB=ho2+SC4H9O2H                 2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.40E+12    0.0    10000.0
8279. c4h9qjA+c4h9qjA=o2+PC4H9O+PC4H9O          1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8280. c4h9qjA+c4h9qjB=PC4H9O+SC4H9O+o2          1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8281. c4h9qjA+nc3h7o2=PC4H9O+nc3h7o+o2          1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8282. c4h9qjA+ic3h7o2=PC4H9O+ic3h7o+o2          1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8283. c4h9qjA+c2h5o2=PC4H9O+c2h5o+o2            1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8284. c4h9qjA+ch3o2=PC4H9O+ch3o+o2              1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8285. c4h9qjA+ch3co3=PC4H9O+ch3co2+o2           1.40E+16   -1.6     1860.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8286. c4h9qjA+ch3=PC4H9O+ch3o                   7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          6.20E+12    0.0    26630.0
8287. c4h9qjA+c2h5=PC4H9O+c2h5o                 7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          8.81E+14   -0.6    29040.0
8288. c4h9qjA+ic3h7=PC4H9O+ic3h7o               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.50E+15   -0.5    29710.0
8289. c4h9qjA+nc3h7=PC4H9O+nc3h7o               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          8.90E+14   -0.6    27710.0
8290. c4h9qjA+pc4h9=PC4H9O+PC4H9O               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.24E+15   -0.6    27390.0
8291. c4h9qjA+sc4h9=PC4H9O+SC4H9O               7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.13E+17   -1.1    29100.0
8292. c4h9qjA+ac3h5=PC4H9O+c3h5o                7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.30E+11    0.2    14050.0
8293. pc4h9+ho2=PC4H9O+oh                       7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          8.63E+15   -0.7    25000.0
8294. sc4h9+ho2=SC4H9O+oh                       7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.49E+18   -1.2    26710.0
8295. ch3o2+pc4h9=ch3o+PC4H9O                   7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.40E+14   -0.4    29240.0
8296. ch3o2+sc4h9=ch3o+SC4H9O                   7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          9.33E+16   -0.9    30950.0
8297. c4h9qjA=c4h8+ho2                          5.04E+38   -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.60E+30   -6.3    20350.0
8298. c4h9qjB=c4h8+ho2                          5.07E+42   -9.4    41490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.60E+33   -7.3    16610.0
8299. c4h9qjB=C4H8-2+ho2                        5.04E+38   -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.62E+29   -5.8    18300.0
8300. IC4H9+ho2=IC4H9O+oh                       7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.71E+15   -0.7    26540.0
8301. TC4H9+ho2=TC4H9O+oh                       7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.08E+18   -1.3    28650.0
8302. ch3o2+IC4H9=ch3o+IC4H9O                   7.00E+12    0.0    -1000.0
```

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.32E+14 | -0.3 | 30780.0 |
| 8303. ch3o2+TC4H9=ch3o+TC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.55E+17 | -1.0 | 32890.0 |
| 8304. IC4H9=IC4H8+h | 3.37E+13 | 0.1 | 33660.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.25E+11 | 0.5 | 2620.0 |
| 8305. IC4H9=c3h6+ch3 | 9.50E+11 | 0.8 | 30700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.89E+03 | 2.7 | 6850.0 |
| 8306. TC4H9=h+IC4H8 | 1.13E+12 | 0.7 | 36560.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.06E+12 | 0.5 | 1230.0 |
| 8307. TC4H9+o2=IC4H8+ho2 | 8.37E-01 | 3.6 | 11960.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.65E+00 | 3.3 | 25500.0 |
| 8308. IC4H9+o2=IC4H8+ho2 | 1.07E+00 | 3.7 | 9322.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.16E-02 | 4.0 | 27150.0 |
| 8309. ic3h7o2+IC4H9=ic3h7o+IC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.81E+12 | 0.2 | 29020.0 |
| 8310. ic3h7o2+TC4H9=ic3h7o+TC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+16 | -0.5 | 31130.0 |
| 8311. c4h8+h=Ac4h7-1+h2 | 7.81E+05 | 2.5 | 12290.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.21E+05 | 2.4 | 6469.0 |
| 8312. c4h8+h=C4H71-2+h2 | 3.90E+05 | 2.5 | 5821.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.56E+04 | 2.5 | 2125.0 |
| 8313. c4h8+oh=Ac4h7-1+h2o | 2.14E+06 | 2.0 | 2778.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.62E+06 | 1.9 | 12120.0 |
| 8314. c4h8+oh=C4H71-2+h2o | 2.22E+06 | 2.0 | 1451.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.30E+05 | 2.0 | 12910.0 |
| 8315. c4h8+ch3o2=Cc4h7-1+ch3o2h | 4.82E+03 | 2.5 | 10530.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.30E+06 | 1.8 | 11330.0 |
| 8316. c4h8+ch3o2=Dc4h7-1+ch3o2h | 2.38E+03 | 2.5 | 16490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.83E+03 | 2.0 | 1440.0 |
| 8317. c4h8+ch3o=Cc4h7-1+ch3oh | 4.00E+01 | 2.9 | 8609.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.47E+02 | 2.7 | 27000.0 |
| 8318. c4h8+ch3co3=Cc4h7-1+ch3co3h | 1.00E+11 | 0.0 | 8000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 10000.0 |
| 8319. c4h8+nc3h7o2=Cc4h7-1+nc3h7o2h | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8320. c4h8+ic3h7o2=Cc4h7-1+ic3h7o2h | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8321. c4h8+c4h9qjA=Cc4h7-1+PC4H9O2H | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8322. c4h8+c4h9qjB=Cc4h7-1+SC4H9O2H | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8323. c4h8+ch3o2=c4h8o#3+ch3o | 1.00E+12 | 0.0 | 14340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8324. C4H8-2=h+Cc4h7-1 | 2.34E+14 | 0.1 | 87890.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8325. C4H8-2+o2=Cc4h7-1+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 39390.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.35E+13 | -0.2 | -924.0 |
| 8326. C4H8-2+h=Cc4h7-1+h2 | 3.46E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.43E+06 | 2.0 | 19660.0 |
| 8327. C4H8-2+oh=Cc4h7-1+h2o | 6.24E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.02E+08 | 1.5 | 32020.0 |
| 8328. C4H8-2+ch3=Cc4h7-1+ch4 | 4.42E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.14E+03 | 3.0 | 23320.0 |
| 8329. C4H8-2+ho2=Cc4h7-1+h2o2 | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.20E+06 | 1.8 | 14770.0 |
| 8330. C4H8-2+ch3o2=Cc4h7-1+ch3o2h | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.92E+07 | 1.6 | 11750.0 |
| 8331. C4H8-2+ch3o=Cc4h7-1+ch3oh | 1.80E+01 | 3.0 | 11990.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.61E+02 | 2.5 | 27420.0 |
| 8332. C4H8-2+c2h5o2=Cc4h7-1+c2h5o2h | 3.20E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 8333. C4H8-2+nc3h7o2=Cc4h7-1+nc3h7o2h | 3.20E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 8334. C4H8-2+ic3h7o2=Cc4h7-1+ic3h7o2h | 3.20E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 8335. C4H8-2+c4h9qjA=Cc4h7-1+PC4H9O2H | 3.20E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 8336. C4H8-2+c4h9qjB=Cc4h7-1+SC4H9O2H | 3.20E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.58E+11 | 0.0 | 14700.0 |
| 8337. c4h8+ho2=c4h8o#3+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 14340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8338. C4H8-2+ho2=c4h8o#3+oh | 5.62E+11 | 0.0 | 12310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8339. C4H8-2+ch3o2=c4h8o#3+ch3o | 5.62E+11 | 0.0 | 12310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8340. c4h8rCqB=C4H8-2+ho2 | 6.22E+19 | -2.5 | 21020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 11750.0 |
| 8341. ic3h7o2+IC4H8=ic3h7o2h+IC4H7 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8342. nc3h7o2+IC4H8=nc3h7o2h+IC4H7 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8343. PC4H8OH=c4h8+oh | 1.08E+16 | -0.7 | 28090.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.75E+12 | 0.0 | -782.0 |
| 8344. SC4H8OH=C4H8-2+oh | 3.38E+17 | -1.2 | 29920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.75E+12 | 0.0 | -782.0 |
| 8345. C4H8OH-1O2=PC4H8OH+o2 | 6.75E+20 | -1.9 | 35520.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8346. C4H8OH-2O2=SC4H8OH+o2 | 7.69E+20 | -2.0 | 35510.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8347. C4H8OH-1O2=c2h5hco+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 25000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8348. C4H8OH-2O2=oh+ch3hco+ch3hco | 1.00E+16 | 0.0 | 25000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8349. Ac4h7-1=c2h2+c2h5 | 1.07E+15 | -0.6 | 30320.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8350. C4H71-2=ac3h4+ch3 | 9.59E+14 | -0.7 | 31260.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8351. C4H72-2=pc3h4+ch3 | 6.33E+10 | 0.5 | 30020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8352. Cc4h7-1+ch3o=c4h8+ch2o | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.48E+12 | 0.3 | 66330.0 |
| 8353. Cc4h7-1+o=acrol+ch3 | 6.03E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.38E+15 | -0.8 | 81630.0 |
| 8354. Cc4h7-1+ho2=C4H7O+oh | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.29E+15 | -1.1 | 15530.0 |
| 8355. Cc4h7-1+ch3o2=C4H7O+ch3o | 9.64E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.12E+17 | -1.7 | 20290.0 |
| 8356. Cc4h7-1+c2h5o2=C4H7O+c2h5o | 3.80E+12 | 0.0 | -1200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 8357. ic3h7o2+IC4H7=ic3h7o+IC4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.04E+09 | 0.9 | 13300.0 |
| 8358. nc3h7o2+IC4H7=nc3h7o+IC4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.18E+11 | 0.2 | 13500.0 |
| 8359. ic3h7o2+Cc4h7-1=ic3h7o+C4H7O | 3.80E+12 | 0.0 | -1200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 8360. nc3h7o2+Cc4h7-1=nc3h7o+C4H7O | 3.80E+12 | 0.0 | -1200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 8361. C4H7O=ch3hco+c2h3 | 7.94E+14 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 20000.0 |
| 8362. C4H7O=acrol+ch3 | 7.94E+14 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 20000.0 |
| 8363. c4h6+oh=c2h5+ch2co | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.73E+12 | 0.0 | 30020.0 |
| 8364. c4h6+oh=ch2o+ac3h5 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.50E+06 | 0.0 | 71060.0 |
| 8365. c4h6+o=c2h4+ch2co | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.38E+11 | 0.0 | 94340.0 |
| 8366. c4h6+o=ch2o+ac3h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+12 | 0.0 | 79050.0 |
| 8367. c4h8o#3+oh=ch2o+ac3h5+h2o | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8368. c4h8o#3+h=ch2o+ac3h5+h2 | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8369. c4h8o#3+o=ch2o+ac3h5+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8370. c4h8o#3+ho2=ch2o+ac3h5+h2o2 | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8371. c4h8o#3+ch3o2=ch2o+ac3h5+ch3o2h | 1.00E+13 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8372. c4h8o#3+ch3=ch2o+ac3h5+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8373. c4h8o#4+oh=ch2o+ac3h5+h2o | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8374. c4h8o#4+h=ch2o+ac3h5+h2 | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8375. c4h8o#4+o=ch2o+ac3h5+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8376. c4h8o#4+ho2=ch2o+ac3h5+h2o2 | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8377. c4h8o#4+ch3o2=ch2o+ac3h5+ch3o2h | 1.00E+13 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8378. c4h8o#4+ch3=ch2o+ac3h5+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8379. c4h8o#5+oh=ch2o+ac3h5+h2o | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8380. c4h8o#5+h=ch2o+ac3h5+h2 | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8381. c4h8o#5+o=ch2o+ac3h5+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8382. c4h8o#5+ho2=ch2o+ac3h5+h2o2 | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8383. c4h8o#5+ch3o2=ch2o+ac3h5+ch3o2h | 1.00E+13 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8384. c4h8o#5+ch3=ch2o+ac3h5+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8385. PC4H9O2H=PC4H9O+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+08 | 1.7 | -4342.0 |
| 8386. SC4H9O2H=SC4H9O+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.59E+08 | 1.8 | -5752.0 |
| 8387. PC4H9O=nc3h7+ch2o | 1.56E+21 | -2.4 | 15230.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 3457.0 |
| 8388. SC4H9O=ch3+c2h5hco | 4.38E+16 | -0.9 | 15200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+10 | 0.0 | 9043.0 |
| 8389. SC4H9O=c2h5+ch3hco | 5.49E+22 | -2.8 | 12650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.33E+10 | 0.0 | 6397.0 |
| 8390. C4H8OOH2-2=butanone+oh | 9.00E+14 | 0.0 | 1500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+10 | 1.3 | 35510.0 |
| 8391. butanone+oh=CH3CHCOCH3+h2o | 8.45E+11 | 0.0 | -228.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.59E+13 | -0.2 | 28620.0 |
| 8392. butanone+oh=c2h5coch2+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.63E+13 | -0.7 | 27670.0 |
| 8393. butanone+ho2=CH3CHCOCH3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 8698.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.23E+13 | -0.6 | 6080.0 |
| 8394. butanone+ho2=c2h5coch2+h2o2 | 2.38E+04 | 2.5 | 14690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.84E+07 | 1.5 | 9702.0 |
| 8395. butanone+o=CH3CHCOCH3+oh | 3.07E+13 | 0.0 | 3400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.85E+13 | -0.2 | 15000.0 |
| 8396. butanone+h=CH3CHCOCH3+h2 | 4.46E+06 | 2.0 | 3200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.93E+07 | 1.8 | 16890.0 |
| 8397. butanone+h=c2h5coch2+h2 | 9.30E+12 | 0.0 | 6357.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.79E+14 | -0.7 | 17680.0 |
| 8398. butanone+o2=CH3CHCOCH3+ho2 | 1.55E+13 | 0.0 | 41970.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.22E+12 | 0.1 | -1822.0 |
| 8399. butanone+ch3=CH3CHCOCH3+ch4 | 1.74E+00 | 3.5 | 3680.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.97E+02 | 3.2 | 17850.0 |
| 8400. butanone+ch3=c2h5coch2+ch4 | 1.62E+11 | 0.0 | 9630.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.27E+14 | -0.7 | 21430.0 |
| 8401. butanone+ch3o=CH3CHCOCH3+ch3oh | 1.45E+11 | 0.0 | 2771.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.03E+11 | -0.2 | 14730.0 |
| 8402. butanone+ch3o=c2h5coch2+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 4660.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.14E+12 | -0.7 | 14250.0 |
| 8403. butanone+ch3o2=CH3CHCOCH3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.64E+14 | -0.7 | 9612.0 |
| 8404. butanone+ch3o2=c2h5coch2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.84E+15 | -1.2 | 9572.0 |
| 8405. butanone+c2h3=CH3CHCOCH3+c2h4 | 3.00E+11 | 0.0 | 3400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.91E+10 | 0.6 | 16440.0 |
| 8406. butanone+c2h5=CH3CHCOCH3+c2h6 | 3.00E+10 | 0.0 | 8600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.32E+14 | -0.8 | 18600.0 |
| 8407. butanone+c2h5=c2h5coch2+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 11600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.14E+15 | -1.3 | 19230.0 |
| 8408. nc3h7hco+oh=C3H6CHO-2+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.10E+03 | 2.4 | 19740.0 |
| 8409. nc3h7hco+oh=C3H6CHO-3+h2o | 5.52E+02 | 3.1 | -1176.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.43E+02 | 3.4 | 25510.0 |
| 8410. nc3h7hco+ho2=C3H6CHO-2+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+02 | 2.9 | 2791.0 |
| 8411. nc3h7hco+ho2=C3H6CHO-3+h2o2 | 3.44E+12 | 0.1 | 17880.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.86E+13 | -0.3 | 13660.0 |
| 8412. nc3h7hco+ch3o2=C3H6CHO-2+ch3o2h | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+03 | 2.4 | 1196.0 |
| 8413. nc3h7hco+ch3o2=C3H6CHO-3+ch3o2h | 3.44E+12 | 0.1 | 17880.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.44E+14 | -0.7 | 12070.0 |
| 8414. C3H6CHO-3=C2H5CHCO+h | 8.43E+15 | -0.6 | 40400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 8415. C3H6CHO-3=acrol+ch3 | 3.17E+14 | -0.4 | 29900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8416. C3H6CHO-2=SC3H5CHO+h | 4.95E+12 | -0.1 | 31300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 2900.0 |
| 8417. C3H6CHO-2=c3h6+hco | 8.25E+12 | -0.2 | 21900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 8418. C2H5CHCO+oh=nc3h7+co2 | 3.73E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8419. C2H5CHCO+h=nc3h7+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8420. C2H5CHCO+o=c3h6+co2 | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8421. SC3H5CHO+oh=SC3H5CO+h2o | 2.69E+10 | 0.8 | -340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.83E+10 | 0.8 | 37090.0 |
| 8422. SC3H5CO=sc3h5+co | 8.60E+15 | 0.0 | 23000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 8423. SC3H5CHO+ho2=SC3H5CO+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+13 | -0.3 | 17890.0 |
| 8424. SC3H5CHO+ch3=SC3H5CO+ch4 | 3.98E+12 | 0.0 | 8700.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.31E+13 | 0.0 | 31460.0 |
| 8425. SC3H5CHO+o=SC3H5CO+oh | 7.18E+12 | 0.0 | 1389.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.31E+12 | 0.0 | 21570.0 |
| 8426. SC3H5CHO+o2=SC3H5CO+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.01E+11 | 0.3 | 2394.0 |
| 8427. SC3H5CHO+h=SC3H5CO+h2 | 2.60E+12 | 0.0 | 2600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.08E+12 | 0.0 | 24880.0 |
| 8428. mvk+oh=ch3hco+ch3co | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8429. mvk+oh=ch2co+c2h3+h2o | 5.10E+11 | 0.0 | 1192.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8430. mvk+ho2=ch2hco+ch3co+oh | 6.03E+09 | 0.0 | 7949.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8431. mvk+ho2=ch2co+c2h3+h2o2 | 8.50E+12 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8432. mvk+ch3o2=ch2hco+ch3co+ch3o | 3.97E+11 | 0.0 | 17050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8433. mvk+ch3o2=ch2co+c2h3+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8434. CH2CHOOHCOCH3=mvk+ho2 | 2.03E+19 | -2.4 | 14130.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.00E+10 | 0.0 | 7800.0 |
| 8435. CH3CHCOCH3=mvk+h | 3.42E+16 | -0.8 | 41770.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 8436. CH3CHOOCOCH3=CH3CHCOCH3+o2 | 1.37E+17 | -1.7 | 28460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 8437. CH3CHOOCOCH3=CH2CHOOHCOCH3 | 8.90E+12 | 0.0 | 29700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.70E+13 | -0.5 | 16960.0 |
| 8438. CH3CHCOCH3=ch3chco+ch3 | 1.41E+15 | -0.4 | 38340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8439. c4h9qjA+IC4H8=PC4H9O2H+IC4H7 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8440. c4h9qjB+IC4H8=SC4H9O2H+IC4H7 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8441. c4h9qjB+IC4H9=SC4H9O+IC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.01E+15 | -0.5 | 28410.0 |
| 8442. c4h9qjB+TC4H9=SC4H9O+TC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.11E+18 | -1.1 | 30520.0 |
| 8443. c4h9qjA+IC4H9=PC4H9O+IC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.31E+14 | -0.6 | 28930.0 |
| 8444. c4h9qjA+TC4H9=PC4H9O+TC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.84E+17 | -1.2 | 31040.0 |
| 8445. c4h9qjA+IC4H7=PC4H9O+IC4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.89E+11 | 0.2 | 13210.0 |
| 8446. c4h9qjB+IC4H7=SC4H9O+IC4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.28E+11 | 0.2 | 12690.0 |
| 8447. nc3h7o2+IC4H9=nc3h7o+IC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.54E+14 | -0.5 | 29220.0 |
| 8448. nc3h7o2+TC4H9=nc3h7o+TC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+17 | -1.2 | 31330.0 |
| 8449. IC4H9O2=IC4H9+o2 | 6.64E+19 | -1.6 | 36080.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8450. TC4H9O2=TC4H9+o2 | 3.33E+24 | -2.5 | 37870.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8451. IC4H9O2+c4h10=IC4H9O2H+sc4h9 | 1.12E+13 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8452. TC4H9O2+c4h10=TC4H9O2H+sc4h9 | 1.12E+13 | 0.0 | 17700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8453. IC4H9O2+c4h10=IC4H9O2H+pc4h9 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8454. TC4H9O2+c4h10=TC4H9O2H+pc4h9 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8455. IC4H9O2+c3h6=IC4H9O2H+ac3h5 | 3.24E+11 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 8456. TC4H9O2+c3h6=TC4H9O2H+ac3h5 | 3.24E+11 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 15000.0 |
| 8457. IC4H9O2+IC4H8=IC4H9O2H+IC4H7 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8458. TC4H9O2+IC4H8=TC4H9O2H+IC4H7 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8459. IC4H9O2+c4h8=IC4H9O2H+Cc4h7-1 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8460. TC4H9O2+c4h8=TC4H9O2H+Cc4h7-1 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8461. IC4H9O2+C4H8-2=IC4H9O2H+Cc4h7-1 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8462. TC4H9O2+C4H8-2=TC4H9O2H+Cc4h7-1 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 |
| 8463. c2h4+TC4H9O2=c2h3+TC4H9O2H | 7.00E+11 | 0.0 | 17110.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10000.0 |
| 8464. TC4H9O2+ch4=TC4H9O2H+ch3 | 1.13E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+08 | 0.0 | 1280.0 |
| 8465. h2+TC4H9O2=h+TC4H9O2H | 3.01E+13 | 0.0 | 26030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.80E+13 | 0.0 | 7950.0 |
| 8466. TC4H9O2+c2h6=TC4H9O2H+c2h5 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8467. TC4H9O2+c3h8=TC4H9O2H+ic3h7 | 2.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8468. TC4H9O2+c3h8=TC4H9O2H+nc3h7 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8469. TC4H9O2+ch3oh=TC4H9O2H+ch2oh | 6.30E+12 | 0.0 | 19360.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+09 | 0.0 | 10000.0 |
| 8470. TC4H9O2+c2h5oh=TC4H9O2H+pc2h4oh | 6.30E+12 | 0.0 | 19360.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.06E+12 | 0.0 | 22100.0 |
| 8471. TC4H9O2+c2h5oh=TC4H9O2H+ch3choh | 4.20E+12 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.04E+12 | 0.0 | 17740.0 |
| 8472. IC4H9O2+ch3hco=IC4H9O2H+ch3co | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8473. TC4H9O2+ch3hco=TC4H9O2H+ch3co | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8474. IC4H9O2+acrol=IC4H9O2H+c2h3co | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8475. TC4H9O2+acrol=TC4H9O2H+c2h3co | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8476. IC4H9O2+c2h5hco=IC4H9O2H+c2h5co | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8477. TC4H9O2+c2h5hco=TC4H9O2H+c2h5co | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8478. IC4H9O2+ho2=IC4H9O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.84E+13 | -0.8 | 33620.0 |
| 8479. TC4H9O2+ho2=TC4H9O2H+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.85E+13 | -0.8 | 33620.0 |
| 8480. IC4H9O2+h2o2=IC4H9O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8481. TC4H9O2+h2o2=TC4H9O2H+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 8482. IC4H9O2+ch2o=IC4H9O2H+hco | 1.30E+11 | 0.0 | 9000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 10100.0 |
| 8483. TC4H9O2+ch2o=TC4H9O2H+hco | 1.30E+11 | 0.0 | 9000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 10100.0 |
| 8484. IC4H9O2+ch3o2=IC4H9O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8485. TC4H9O2+ch3o2=TC4H9O+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8486. IC4H9O2+c2h5o2=IC4H9O+c2h5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8487. TC4H9O2+c2h5o2=TC4H9O+c2h5o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8488. IC4H9O2+ch3co3=IC4H9O+ch3co2+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8489. TC4H9O2+ch3co3=TC4H9O+ch3co2+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8490. IC4H9O2+IC4H9O2=o2+IC4H9O+IC4H9O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8491. IC4H9O2+TC4H9O2=IC4H9O+TC4H9O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8492. TC4H9O2+TC4H9O2=o2+TC4H9O+TC4H9O | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8493. IC4H9O2+c4h9qjA=IC4H9O+PC4H9O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8494. TC4H9O2+c4h9qjA=TC4H9O+PC4H9O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8495. IC4H9O2+c4h9qjB=IC4H9O+SC4H9O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8496. TC4H9O2+c4h9qjB=TC4H9O+SC4H9O+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8497. IC4H9O2+nc3h7o2=IC4H9O+nc3h7o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8498. TC4H9O2+nc3h7o2=TC4H9O+nc3h7o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8499. IC4H9O2+ic3h7o2=IC4H9O+ic3h7o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8500. TC4H9O2+ic3h7o2=TC4H9O+ic3h7o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8501. IC4H9O2+ho2=IC4H9O+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8502. TC4H9O2+ho2=TC4H9O+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8503. IC4H9O2+ch3=IC4H9O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.72E+12 | 0.0 | 28020.0 |
| 8504. IC4H9O2+c2h5=IC4H9O+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.13E+14 | -0.6 | 30430.0 |
| 8505. IC4H9O2+ic3h7=IC4H9O+ic3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.39E+15 | -0.4 | 31100.0 |
| 8506. IC4H9O2+nc3h7=IC4H9O+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.21E+14 | -0.6 | 29100.0 |
| 8507. IC4H9O2+pc4h9=IC4H9O+PC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+15 | -0.6 | 28780.0 |
| 8508. IC4H9O2+sc4h9=IC4H9O+SC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.97E+17 | -1.1 | 30490.0 |
| 8509. IC4H9O2+IC4H9=IC4H9O+IC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.90E+14 | -0.5 | 30320.0 |
| 8510. IC4H9O2+TC4H9=IC4H9O+TC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.39E+17 | -1.2 | 32430.0 |
| 8511. IC4H9O2+ac3h5=IC4H9O+c3h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.12E+11 | 0.2 | 15440.0 |
| 8512. IC4H9O2+Cc4h7-1=IC4H9O+C4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.10E+14 | -0.8 | 17490.0 |
| 8513. IC4H9O2+IC4H7=IC4H9O+IC4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.51E+11 | 0.2 | 14600.0 |
| 8514. TC4H9O2+ch3=TC4H9O+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.82E+11 | 0.2 | 28340.0 |
| 8515. TC4H9O2+c2h5=TC4H9O+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.11E+14 | -0.4 | 30750.0 |
| 8516. TC4H9O2+ic3h7=TC4H9O+ic3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+14 | -0.2 | 31420.0 |
| 8517. TC4H9O2+nc3h7=TC4H9O+nc3h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.12E+14 | -0.3 | 29420.0 |
| 8518. TC4H9O2+pc4h9=TC4H9O+PC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.56E+14 | -0.4 | 29100.0 |
| 8519. TC4H9O2+sc4h9=TC4H9O+SC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.69E+16 | -0.9 | 30810.0 |
| 8520. TC4H9O2+IC4H9=TC4H9O+IC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.70E+13 | -0.3 | 30640.0 |
| 8521. TC4H9O2+TC4H9=TC4H9O+TC4H9O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.37E+16 | -1.0 | 32750.0 |
| 8522. TC4H9O2+ac3h5=TC4H9O+c3h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.90E+10 | 0.4 | 15760.0 |
| 8523. TC4H9O2+Cc4h7-1=TC4H9O+C4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+13 | -0.5 | 17810.0 |
| 8524. TC4H9O2+IC4H7=TC4H9O+IC4H7O | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.17E+10 | 0.4 | 14920.0 |
| 8525. IC4H9O2+c2h4=IC4H9O2H+c2h3 | 2.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 8000.0 |
| 8526. IC4H9O2+ch4=IC4H9O2H+ch3 | 1.13E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.50E+08 | 0.0 | 1280.0 |
| 8527. h2+IC4H9O2=h+IC4H9O2H | 3.01E+13 | 0.0 | 26030.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.80E+13 | 0.0 | 7950.0 |
| 8528. IC4H9O2+c2h6=IC4H9O2H+c2h5 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8529. IC4H9O2+c3h8=IC4H9O2H+ic3h7 | 2.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8530. IC4H9O2+c3h8=IC4H9O2H+nc3h7 | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.00E+11 | 0.0 | 6500.0 |
| 8531. IC4H9O2+ch3oh=IC4H9O2H+ch2oh | 6.30E+12 | 0.0 | 19360.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+09 | 0.0 | 10000.0 |
| 8532. IC4H9O2+c2h5oh=IC4H9O2H+pc2h4oh | 6.30E+12 | 0.0 | 19360.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.06E+12 | 0.0 | 22100.0 |
| 8533. IC4H9O2+c2h5oh=IC4H9O2H+ch3choh | 4.20E+12 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.04E+12 | 0.0 | 17740.0 |
| 8534. IC4H9O2=IC4H8O2H-I | 7.50E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.82E+11 | -0.5 | 8946.0 |
| 8535. TC4H9O2=TC4H8O2H-I | 9.00E+11 | 0.0 | 34500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.03E+09 | 0.1 | 16940.0 |
| 8536. IC4H9O2=IC4H8O2H-T | 1.00E+11 | 0.0 | 29200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.08E+06 | 0.8 | 15880.0 |
| 8537. IC4H9O2=IC4H8+ho2 | 2.27E+35 | -7.2 | 39490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.00E+26 | -5.3 | 21240.0 |
| 8538. TC4H9O2=IC4H8+ho2 | 7.61E+42 | -9.4 | 41490.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.34E+31 | -7.2 | 17160.0 |
| 8539. IC4H9O+oh=ic3h7cho+h2o | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.21E+13 | 0.1 | 103600.0 |
| 8540. IC4H9O+ch3=ic3h7cho+ch4 | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.37E+14 | 0.1 | 88920.0 |
| 8541. IC4H9O+o=ic3h7cho+oh | 6.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+12 | 0.1 | 86350.0 |
| 8542. IC4H9O+h=ic3h7cho+h2 | 1.99E+13 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+13 | 0.1 | 88440.0 |
| 8543. IC4H9O=ic3h7cho+h | 4.00E+14 | 0.0 | 21500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+10 | 1.1 | 2500.0 |
| 8544. IC4H9O=ch2o+ic3h7 | 2.00E+14 | 0.0 | 17500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.88E+02 | 2.8 | 4591.0 |
| 8545. TC4H9O=aceton+ch3 | 9.56E+22 | -2.5 | 18650.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 8546. IC4H9O+o2=ic3h7cho+ho2 | 1.93E+11 | 0.0 | 1660.0 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.03E+08 | 0.6 | 33200.0 |
| 8547. TC4H9O+o2=IC4H8O+ho2 | 8.10E+11 | 0.0 | 4700.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 32000.0 |
| 8548. IC4H9O2H=IC4H9O+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+08 | 1.7 | -2942.0 |
| 8549. TC4H9O2H=TC4H9O+oh | 5.95E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.68E+06 | 1.9 | -2582.0 |
| 8550. IC4H9O+ho2=ic3h7cho+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.38E+13 | -0.2 | 72130.0 |
| 8551. IC4H8O=ic3h7cho | 4.18E+13 | 0.0 | 52720.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.39E+10 | 0.6 | 72050.0 |
| 8552. IC4H8O+oh=ic3h6cho+h2o | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.61E+05 | 1.1 | 36560.0 |
| 8553. IC4H8O+h=ic3h6cho+h2 | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.06E+04 | 1.2 | 21670.0 |
| 8554. IC4H8O+ho2=ic3h6cho+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.05E+08 | 0.5 | 20660.0 |
| 8555. IC4H8O+ch3o2=ic3h6cho+ch3o2h | 2.50E+12 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.04E+09 | 0.0 | 23070.0 |
| 8556. IC4H8O+ch3=ic3h6cho+ch4 | 5.00E+10 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.31E+06 | 0.7 | 33210.0 |
| 8557. IC4H8O+o=ic3h6cho+oh | 1.25E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.70E+04 | 1.2 | 20250.0 |
| 8558. IC4H8OH=IC4H8+oh | 9.23E+14 | -0.6 | 28050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.93E+11 | 0.0 | -960.0 |
| 8559. IO2C4H8OH=IC4H8OH+o2 | 1.92E+21 | -2.4 | 35790.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.20E+11 | 0.0 | -1100.0 |
| 8560. IO2C4H8OH=aceton+ch2o+oh | 1.25E+10 | 0.0 | 18900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8561. CC4H8O+oh=ch2o+ac3h5+h2o | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8562. CC4H8O+h=ch2o+ac3h5+h2 | 3.51E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8563. CC4H8O+o=ch2o+ac3h5+oh | 1.12E+14 | 0.0 | 5200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8564. CC4H8O+ho2=ch2o+ac3h5+h2o2 | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8565. CC4H8O+ch3o2=ch2o+ac3h5+ch3o2h | 1.00E+13 | 0.0 | 19000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8566. CC4H8O+ch3=ch2o+ac3h5+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 10000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8567. IC4H8OOH-IO2=IC4H8O2H-I+o2 | 1.44E+20 | -1.6 | 35690.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8568. TC4H8OOH-IO2=TC4H8O2H-I+o2 | 5.17E+22 | -2.3 | 37800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.26E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8569. IC4H8OOH-TO2=IC4H8O2H-T+o2 | 2.27E+27 | -3.2 | 39640.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8570. IC4H8OOH-IO2=IC4KETII+oh | 5.00E+10 | 0.0 | 21400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.99E+03 | 1.5 | 44420.0 |
| 8571. IC4H8OOH-TO2=IC4KETIT+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 31500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.91E+05 | 1.2 | 53830.0 |
| 8572. TC4H8OOH-IO2=TIC4H7Q2-I | 7.50E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.36E+08 | 0.1 | 11720.0 |
| 8573. TIC4H7Q2-I=IC4H7OOH+ho2 | 1.94E+20 | -2.2 | 22590.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 10600.0 |
| 8574. IC4H8OOH-IO2=IIC4H7Q2-I | 3.75E+10 | 0.0 | 24400.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.99E+08 | -0.1 | 11900.0 |
| 8575. IC4H8OOH-IO2=IIC4H7Q2-T | 1.00E+11 | 0.0 | 29200.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 9.45E+07 | 0.4 | 21200.0 |
| 8576. IC4H8OOH-TO2=TIC4H7Q2-I | 6.00E+11 | 0.0 | 34500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.09E+09 | 0.1 | 21820.0 |
| 8577. IIC4H7Q2-I=AC3H5OOH+CH2O2H | 7.63E+19 | -1.7 | 38310.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 8.50E+10 | 0.0 | 10600.0 |
| 8578. IIC4H7Q2-T=IC4H7OOH+ho2 | 4.08E+17 | -1.6 | 18390.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 7800.0 |
| 8579. IC4KETII=ch2o+c2h5co+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8580. IC4KETIT=aceton+hco+oh | 9.50E+15 | 0.0 | 42540.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8581. TC4H8O2H-I=IC4H8+ho2 | 1.07E+20 | -2.1 | 19390.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.97E+11 | 0.0 | 12620.0 |
| 8582. IC4H8O2H-T=IC4H8+ho2 | 1.53E+16 | -1.1 | 17560.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.97E+11 | 0.0 | 12620.0 |
| 8583. IC4H8O2H-I=CC4H8O+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 19500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8584. IC4H8O2H-T=IC4H8O+oh | 1.38E+12 | 0.0 | 14800.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8585. TC4H8O2H-I=IC4H8O+oh | 4.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8586. IC4H8O2H-I=oh+ch2o+c3h6 | 8.45E+15 | -0.7 | 29170.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8587. IC4H8=tc3h5+ch3 | 1.92E+66 | -14.2 | 128100.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.56E+56 | -12.3 | 26100.0 |
| 8588. IC4H8=IC4H7+h | 3.07E+55 | -11.5 | 114300.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.43E+55 | -11.7 | 26400.0 |
| 8589. IC4H8+h=c3h6+ch3 | 5.68E+33 | -5.7 | 20000.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.09E+26 | -4.2 | 27200.0 |
| 8590. IC4H8+h=IC4H7+h2 | 3.40E+05 | 2.5 | 2492.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.32E+04 | 2.5 | 18160.0 |
| 8591. IC4H8+o=ch2co+ch3+ch3 | 3.33E+07 | 1.8 | 76.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8592. IC4H8+o=ic3h6co+h+h | 1.66E+07 | 1.8 | 76.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 0.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 8593. IC4H8+o=IC4H7+oh | 1.21E+11 | 0.7 | 7633.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.16E+10 | 0.7 | 21890.0 |
| 8594. IC4H8+ch3=IC4H7+ch4 | 4.42E+00 | 3.5 | 5675.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 7.49E+02 | 3.1 | 22890.0 |
| 8595. IC4H8+ho2=IC4H7+h2o2 | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 2.07E+06 | 1.9 | 13580.0 |
| 8596. IC4H8+o2cho=IC4H7+ho2cho | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 6.51E-07 | 4.9 | -3468.0 |
| 8597. IC4H8+o2=IC4H7+ho2 | 6.00E+12 | 0.0 | 39900.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.85E+12 | -0.3 | 883.0 |
| 8598. IC4H8+ac3h5=IC4H7+c3h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.40E+20 | -1.3 | 60610.0 |
| 8599. IC4H8+sc3h5=IC4H7+c3h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.59E+20 | -1.3 | 82170.0 |
| 8600. IC4H8+tc3h5=IC4H7+c3h6 | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 5.59E+20 | -1.3 | 80170.0 |
| 8601. IC4H8+oh=IC4H7+h2o | 5.20E+06 | 2.0 | -298.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.02E+07 | 1.9 | 30270.0 |
| 8602. IC4H8+o=ic3h7+hco | 1.58E+07 | 1.8 | -1216.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.54E+00 | 3.1 | 21690.0 |
| 8603. IC4H8+ch3o2=IC4H7+ch3o2h | 1.93E+04 | 2.6 | 13910.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 4.03E+07 | 1.5 | 11990.0 |
| 8604. IC4H8+ho2=IC4H8O+oh | 1.29E+12 | 0.0 | 13340.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+12 | 0.0 | 7500.0 |
| 8605. IC4H7+o2=ic3h5cho+oh | 2.47E+13 | -0.5 | 23020.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 3.37E+13 | -0.6 | 73010.0 |
| 8606. IC4H7+o2=ch2coch3+ch2o | 7.14E+15 | -1.2 | 21050.0 |
| Reverse Arrhenius coefficients: | 1.70E+12 | -0.4 | 88250.0 |
| 8607. IC4H7+o2=ac3h4+ch2o+oh | 7.29E+29 | -5.7 | 21450.0 |

```
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00    0.0        0.0
8608. IC4H7+o=ic3h5cho+h                          6.03E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.84E+16   -0.5    66730.0
8609. IC4H7=ac3h4+ch3                             1.23E+47   -9.7    74260.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.65E+38   -7.8    22540.0
8610. ch3o2+IC4H7=ch3o+IC4H7O                     7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.14E+11    0.3    15060.0
8611. IC4H7+ho2=IC4H7O+oh                         7.00E+13    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.42E+13    0.1    10820.0
8612. IC4H7O=tc3h5+ch2o                           2.92E+22   -2.4    35590.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+12    0.0    12600.0
8613. IC4H7O=IC4H6OH                              1.39E+11    0.0    15600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.23E+11   -0.2    31670.0
8614. IC4H7O=ic3h5cho+h                           5.00E+13    0.0    29100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.67E+13   -0.1    18410.0
8615. IC4H7O+o2=ic3h5cho+ho2                      3.00E+10    0.0     1649.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.31E+10   -0.1    38980.0
8616. IC4H7O+ho2=ic3h5cho+h2o2                    3.00E+11    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.93E+14   -0.8    78500.0
8617. IC4H7O+ch3=ic3h5cho+ch4                     2.40E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.26E+16   -0.5    95290.0
8618. IC4H7O+o=ic3h5cho+oh                        6.00E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.05E+14   -0.5    92720.0
8619. IC4H7O+oh=ic3h5cho+h2o                      1.81E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            9.08E+15   -0.5   110000.0
8620. IC4H7O+h=ic3h5cho+h2                        1.99E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.30E+15   -0.5    94810.0
8621. IC4H7OOH=IC4H7O+oh                          6.40E+15    0.0    45550.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0        0.0
8622. IC4H7O+h2=IC4H7OH+h                         9.05E+06    2.0    17830.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.16E+05    2.4    16310.0
8623. IC4H7O+ch2o=IC4H7OH+hco                     1.15E+11    0.0     1280.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.02E+11    0.0    18160.0
8624. IC4H7O+IC4H8=IC4H7OH+IC4H7                  2.70E+11    0.0     4000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+10    0.0     9000.0
8625. IC4H7OH=IC4H6OH+h                           4.90E+16   -0.4    89850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+14    0.0        0.0
8626. IC4H7OH+ho2=IC4H6OH+h2o2                    7.64E+03    2.7    13930.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.83E+05    2.0    13580.0
8627. IC4H7OH=IC4H7O+h                            5.97E+16   -0.6   105900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.00E+13    0.0        0.0
8628. IC4H8OH=IC4H7OH+h                           1.71E+12    0.3    38850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+13    0.0     1200.0
8629. IC4H7OH=IC4H7+oh                            7.31E+16   -0.4    79700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.00E+13    0.0        0.0
8630. tc3h6cho+ho2=TC3H6OCHO+oh                   9.64E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.02E+17   -1.2    21010.0
8631. TC3H6OCHO=aceton+hco                        3.98E+13    0.0     9700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.17E+08    0.8    14240.0
8632. tc3h6cho+IC4H8=ic3h7cho+IC4H7               4.70E+02    3.3    19840.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.61E+00    3.4     8672.0
8633. TC3H6OHCHO=tc3h6cho+oh                      9.99E+20   -1.5    87480.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+13    0.0        0.0
8634. TC3H6OHCHO=tc3h6oh+hco                      5.16E+23   -1.9    76850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.81E+13    0.0        0.0
8635. TC3H6O2CHO=tc3h6cho+o2                      2.46E+25   -4.1    27080.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.99E+17   -2.1        0.0
8636. TC3H6O2CHO=IC3H5O2HCHO                      6.00E+11    0.0    29880.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.01E+12   -0.5    17110.0
8637. TC3H6O2CHO=TC3H6O2HCO                       1.00E+11    0.0    25750.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.63E+12   -0.5    25100.0
8638. IC3H5O2HCHO=ic3h5cho+ho2                    8.94E+20   -2.4    15030.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.23E+11    0.0    10600.0
8639. TC3H6O2HCO=aceton+co+oh                     4.24E+18   -1.4     4800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00    0.0        0.0
8640. IC4H6OH+ho2=CH2CCH2OH+ch2o+oh               1.45E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00    0.0        0.0
8641. IC4H8+CH2CCH2OH=IC4H7+c3h5oh                7.94E+11    0.0    20500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.75E+11   -0.1    28470.0
8642. IC4H7OH=CH2CCH2OH+ch3                       1.25E+20   -1.0    98570.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.00E+13    0.0        0.0
8643. IC4H6OH+h2o=IC4H7OH+oh                      5.88E+06    1.9    30240.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.12E+06    2.0     -298.0
8644. IC4H6OH+ch4=IC4H7OH+ch3                     3.57E+02    3.1    22870.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.21E+00    3.5     5675.0
8645. IC4H6OH+c3h6=IC4H7OH+ac3h5                  2.51E+02    3.2    18640.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.75E+02    3.1    18660.0
8646. IC4H6OH+ch3hco=IC4H7OH+ch3co                1.36E+09    1.4    17940.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.30E+06    2.0    16240.0
8647. IC4H6OH+h2=IC4H7OH+h                        2.16E+04    2.4    18990.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.61E+02    3.0     1399.0
8648. IC4H6OH+ho2=IC4H7OH+o2                      5.57E+13   -0.3      862.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.00E+13    0.0    39900.0
8649. IC4H6OH+ch2o=IC4H7OH+hco                    6.30E+08    1.9    18190.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.10E+07    2.1    17730.0
8650. IC4H6OH+IC4H8=IC4H7OH+IC4H7                 4.70E+02    3.3    19840.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.81E-01    3.9     6521.0
8651. IC4H6OH=ac3h4+ch2oh                         7.24E+19   -1.9    57050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0     9200.0
8652. ac3h5hco+oh=C2H3CHCHO+h2o                   3.12E+06    2.0     -298.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.25E+08    1.8    34930.0
8653. ac3h5hco+ho2=C2H3CHCHO+h2o2                 9.63E+03    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.28E+06    2.1    17670.0
8654. ac3h5hco+ch3o2=C2H3CHCHO+ch3o2h             1.99E+12    0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.94E+15   -0.7    20090.0
8655. C2H3CHCHO+ho2=acrol+hco+oh                  8.91E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            0.00E+00    0.0        0.0
8656. CH3CHCHO=acrol+h                            3.52E+15   -0.5    41060.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.50E+12    0.0     2900.0
8657. CH3CHCHO=ch3chco+h                          1.14E+16   -0.7    40310.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.00E+12    0.0     1200.0
8658. CH3CHCHO+h2=c2h5hco+h                       2.16E+05    2.4    18990.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.31E+04    2.6     5265.0
8659. aceton(+M)=ch3co+ch3(+M)                    7.11E+21   -1.6    84680.0
    Low pressure limit:  0.70130E+90 -0.20380E+02  0.10715E+06
    TROE centering:      0.86300E+00  0.10000E+11  0.41640E+03  0.32900E+10
8660. acrol+o2=c2h3co+ho2                         1.00E+13    0.0    40700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.30E+11    0.3     5391.0
8661. acrol+ch3o=c2h3co+ch3oh                     1.00E+12    0.0     3300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.30E+10    0.4    22910.0
8662. c2h3co=c2h3+co                              1.37E+21   -2.2    39410.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.51E+11    0.0     4810.0
8663. c3h8=nc3h7+h                                3.75E+17   -0.4   101200.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+14    0.0        0.0
8664. c3h8=ic3h7+h                                2.38E+18   -0.7    98680.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+14    0.0        0.0
8665. ic3h7=h+c3h6                                6.92E+13    0.0    37690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.64E+13    0.0     2160.0
8666. nc3h7=h+c3h6                                8.78E+39   -8.1    46580.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.07E+37   -7.4    12020.0
8667. ic3h7o2=C3H6OOH2-2                          1.23E+35   -7.0    48880.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.38E+34   -7.1    44940.0
```

```
8668. c3h6ooh2-1=C2H3OOH+ch3                    6.54E+27   -5.1    38320.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.46E+22   -4.2    10630.0
8669. c3h6ooh1-2=c2h4+ch2o+oh                   1.31E+33   -7.0    48120.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8670. C3H6OOH2-2=aceton+oh                      9.00E+14    0.0     1500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.02E+14    0.3    36750.0
8671. c3h6ooh2-1o2=C3H51-2,3OOH                 1.12E+11    0.0    24400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.39E+11   -0.5     8920.0
8672. c3h6ooh1-2o2=C3H51-2,3OOH                 9.00E+11    0.0    29400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.91E+12   -0.5    13920.0
8673. C3H51-2,3OOH=AC3H5OOH+ho2                 2.56E+13   -0.5    17770.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.18E+15   -1.2    12040.0
8674. C3H52-1,3OOH=c3h6ooh1-3o2                 1.26E+12   -0.4    13940.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          6.00E+11    0.0    26850.0
8675. C3H52-1,3OOH=AC3H5OOH+ho2                 1.15E+14   -0.6    17250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.56E+11    0.1    10200.0
8676. AC3H5OOH=c3h5o+oh                         3.88E+19   -1.5    45370.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.00E+13    0.0        0.0
8677. ic3h7o2=c3h6+ho2                          1.01E+43   -9.4    41490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.95E+33   -7.3    16670.0
8678. nc3h7o2=c3h6+ho2                          5.04E+38   -8.1    40490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.20E+30   -6.2    20420.0
8679. c3h5oh+ho2=CH2CCH2OH+h2o2                 1.76E+09    0.3    22590.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.01E+09    0.0     2583.0
8680. c3h5oh+oh=CH2CCH2OH+h2o                   5.06E+12    0.0     5960.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.46E+12    0.1    17410.0
8681. c3h5oh+h=CH2CCH2OH+h2                     3.90E+05    2.5     5821.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.59E+04    2.5     2121.0
8682. c3h5oh+o2=CH2CCH2OH+ho2                   4.00E+13    0.0    60690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.83E+10    0.4     -492.0
8683. c3h5oh+ch3=CH2CCH2OH+ch4                  2.40E+11    0.0     8030.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.17E+11    0.1     4810.0
8684. c3h5oh=CH2CCH2OH+h                        2.84E+19   -1.1   111100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+14    0.0        0.0
8685. CH2CCH2OH+o2=ch2oh+co+ch2o                4.34E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8686. CH2CCH2OH=c2h2+ch2oh                      2.16E+40   -8.3    45110.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.61E+40   -8.6    20330.0
8687. CH2CCH2OH=ac3h4+oh                        6.70E+16   -1.1    42580.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          8.50E+12    0.0     2000.0
8688. CH2CCHO+oh=ch3co+hco                      1.00E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.26E+10    0.5    39310.0
8689. CH2CCHO+ho2=ch2co+hco+oh                  6.03E+09    0.0     7949.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8690. CH2CCHO+ch3o2=ch2co+hco+ch3o              3.97E+11    0.0    17050.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8691. c2h5+o2=c2h4o+oh                          1.63E+11   -0.3     6150.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          3.63E+13   -0.6    39840.0
8692. c2h5o2=ch3hco+oh                          2.52E+41  -10.2    43710.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.50E+36   -9.3    69840.0
8693. c2h5o2=c2h4o+oh                           4.00E+43  -10.5    45580.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.96E+40   -9.8    44710.0
8694. c2h4o2h=ch3hco+oh                         1.19E+34   -9.0    29210.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.34E+32   -8.5    73480.0
8695. ch3hco+oh=ch2hco+h2o                      1.72E+05    2.4      815.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.33E+05    2.5    24950.0
8696. ch2hco=ch2co+h                            4.07E+15   -0.3    50600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+13    0.0    12300.0
8697. C2H3OOH=ch2hco+oh                         8.40E+14    0.0    43000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0        0.0
8698. hcco+oh=h2+co+co                          1.00E+14    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8699. hcco+o2=oh+co+co                          4.20E+10    0.0      850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8700. c2h5oh+ch3o2=pc2h4oh+ch3o2h               1.23E+04    2.5    15750.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.89E+04    2.0      488.0
8701. c2h5oh+ch3o2=ch3choh+ch3o2h               8.20E+03    2.5    10750.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.28E+05    1.9     2574.0
8702. c2h5oh+ch3o2=c2h5o+ch3o2h                 2.50E+12    0.0    24000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.30E+15   -0.9     6187.0
8703. CH3OCH3(+M)=ch3+ch3o(+M)                  7.25E+21   -0.9    80250.0
    Low pressure limit:  0.35000E+61 -0.11560E+02  0.10100E+06
    TROE centering:      0.18300E+00  0.13000E+01  0.13000E+05  0.67100E+10
8704. CH3OCH3+oh=CH3OCH2+h2o                    6.32E+06    2.0     -651.7
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.85E+04    2.2    21210.0
8705. CH3OCH3+h=CH3OCH2+h2                      7.72E+06    2.1     3384.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          9.04E+03    2.4    10360.0
8706. CH3OCH3+o=CH3OCH2+oh                      7.75E+08    1.4     2250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          4.71E+05    1.7     7810.0
8707. CH3OCH3+ho2=CH3OCH2+h2o2                  1.68E+13    0.0    17690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.14E+13   -0.3     8657.0
8708. CH3OCH3+ch3o2=CH3OCH2+ch3o2h              1.68E+13    0.0    17690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.22E+14   -0.8     7062.0
8709. CH3OCH3+ch3=CH3OCH2+ch4                   1.44E-06    5.7     5700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.54E-06    5.6    14210.0
8710. CH3OCH3+o2=CH3OCH2+ho2                    4.10E+13    0.0    44910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.52E+11    0.0    -2806.0
8711. CH3OCH3+ch3o=CH3OCH2+ch3oh                6.02E+11    0.0     4074.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.38E+10   -0.3    10260.0
8712. CH3OCH3+CH3OCH2O2=CH3OCH2+CH3OCH2O2H      5.00E+12    0.0    17690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          6.43E+13   -0.8     7258.0
8713. CH3OCH3+o2cho=CH3OCH2+ho2cho              4.42E+04    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.72E+06    1.8     5832.0
8714. CH3OCH3+ocho=CH3OCH2+hocho                1.00E+13    0.0    17690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.20E+12   -0.3    33130.0
8715. CH3OCH2=ch2o+ch3                          1.60E+13    0.0    25500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.60E+05    1.9    16670.0
8716. CH3OCH2+ch3o=CH3OCH3+ch2o                 2.41E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.25E+14    0.3    78540.0
8717. CH3OCH2+ch2o=CH3OCH3+hco                  5.49E+03    2.8     5862.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.77E+04    2.8    14080.0
8718. CH3OCH2+ch3hco=CH3OCH3+ch3co              1.26E+12    0.0     8499.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.75E+11    0.3    16980.0
8719. CH3OCH2O2=CH3OCH2+o2                      4.44E+19   -1.6    36240.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.00E+12    0.0        0.0
8720. CH3OCH2O2+ch2o=CH3OCH2O2H+hco             1.00E+12    0.0    11660.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          6.48E+13   -0.8     9455.0
8721. CH3OCH2O2+ch3hco=CH3OCH2O2H+ch3co         2.80E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+12    0.0    10000.0
8722. CH3OCH2O2+CH3OCH2O2=o2+CH3OCH2O+CH3OCH2O  2.21E+23   -4.5        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8723. CH3OCH2O2H=CH3OCH2O+oh                    2.11E+22   -2.1    43830.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          2.00E+13    0.0        0.0
8724. CH3OCH2O2=CH2OCH2O2H                      6.00E+10    0.0    21580.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          1.25E+12   -0.8    11120.0
8725. CH2OCH2O2H=oh+ch2o+ch2o                   1.50E+13    0.0    20760.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0        0.0
8726. O2CH2OCH2O2H=CH2OCH2O2H+o2                1.92E+19   -1.6    36270.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          7.00E+11    0.0        0.0
8727. O2CH2OCH2O2H=HO2CH2OCHO+oh                4.00E+10    0.0    18580.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          5.04E+03    1.4    59640.0
8728. CH3OCHO=CH2OCHO+h                         8.24E+19   -1.1   102500.0
```

```
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+14    0.0        0.0
8729. CH3OCHO=CH3OCO+h                            1.32E+19   -1.0   100100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+14    0.0        0.0
8730. CH3OCHO(+M)=ch3oh+co(+M)                    1.00E+14    0.0    62500.0
    Low pressure limit:  0.61430E+61 -0.12070E+02  0.75400E+05
    TROE centering:      0.78000E+00  0.82800E+10  0.43890E+03  0.67000E+09
8731. CH3OCHO=ch3o+hco                            5.37E+16    0.0    97090.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.00E+13    0.0        0.0
8732. CH3OCHO=ch3+ocho                            3.21E+17   -0.5    79970.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+13    0.0        0.0
8733. CH3OCHO+o2=CH3OCO+ho2                       1.00E+13    0.0    49700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.98E+10    0.3        1.0
8734. CH3OCHO+o2=CH2OCHO+ho2                      2.05E+13    0.0    52000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.14E+10    0.4      331.0
8735. CH3OCHO+oh=CH3OCO+h2o                       1.58E+07    1.8      934.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            9.52E+04    2.4    20820.0
8736. CH3OCHO+oh=CH2OCHO+h2o                      5.27E+09    1.0     1586.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.11E+07    1.6    19500.0
8737. CH3OCHO+ho2=CH3OCO+h2o2                     4.82E+03    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.58E+03    2.6     2899.0
8738. CH3OCHO+ho2=CH2OCHO+h2o2                    2.38E+04    2.5    16490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.75E+03    2.6     3513.0
8739. CH3OCHO+o=CH3OCO+oh                         2.76E+05    2.5     2830.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.13E+01    3.1     6408.0
8740. CH3OCHO+o=CH2OCHO+oh                        9.80E+05    2.4     4750.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.01E+02    3.1     6358.0
8741. CH3OCHO+h=CH3OCO+h2                         6.50E+05    2.4     4471.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.69E+02    3.1     9461.0
8742. CH3OCHO+h=CH2OCHO+h2                        6.65E+05    2.5     6756.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.33E+02    3.2     9776.0
8743. CH3OCHO+ch3=CH3OCO+ch4                      7.55E-01    3.5     5481.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.91E-01    3.7    12010.0
8744. CH3OCHO+ch3=CH2OCHO+ch4                     4.52E-01    3.6     7154.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.22E-02    3.9    11710.0
8745. CH3OCHO+ch3o=CH3OCO+ch3oh                   5.48E+11    0.0     5000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.68E+09    0.5    10220.0
8746. CH3OCHO+ch3o=CH2OCHO+ch3oh                  2.17E+11    0.0     6458.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            9.29E+08    0.5     9705.0
8747. CH3OCHO+ch3o2=CH3OCO+ch3o2h                 4.82E+03    2.6    13910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.08E+04    2.1     1304.0
8748. CH3OCHO+ch3o2=CH2OCHO+ch3o2h                2.38E+04    2.5    16490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.34E+04    2.1     1918.0
8749. CH3OCHO+hco=CH3OCO+ch2o                     5.40E+06    1.9    17010.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.20E+05    2.3     6806.0
8750. CH3OCHO+hco=CH2OCHO+ch2o                    1.02E+05    2.5    18430.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.46E+03    2.9     6261.0
8751. CH2OCHO=CH3OCO                              2.62E+11    0.0    38180.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.63E+12   -0.2    40670.0
8752. CH3OCO=ch3+co2                              3.59E+14   -0.2    16010.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.76E+07    1.5    34700.0
8753. CH3OCO=ch3o+co                              1.43E+15    0.0    23770.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.55E+06    2.0     5730.0
8754. CH2OCHO=ch2o+hco                            4.66E+12    0.1    27440.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+11    0.0    11900.0
8755. CH3OCH2O+o2=CH3OCHO+ho2                     5.00E+10    0.0      500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.09E+10    0.0    46480.0
8756. CH3OCH2O=CH3OCHO+h                          6.06E+12    0.1     8218.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+13    0.0     7838.0
8757. CH3OCH2O=ch3o+ch2o                          4.38E+19   -2.0    25190.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+11    0.0    11900.0
8758. HO2CH2OCHO=OCH2OCHO+oh                      2.00E+16    0.0    40500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.18E+08    1.9    -3952.0
8759. OCH2OCHO=ch2o+ocho                          2.90E+19   -2.2    31850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.25E+11    0.0    11900.0
8760. OCH2OCHO=HOCH2OCO                           1.00E+11    0.0    14000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.57E+09    0.5    20670.0
8761. HOCH2OCO=HOCH2O+co                          2.24E+19   -2.0    19690.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+11    0.0     4800.0
8762. HOCH2OCO=ch2oh+co2                          2.41E+17   -1.6    22120.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+11    0.0     3720.0
8763. HOCH2O=ch2o+oh                              2.06E+21   -2.3    25730.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.50E+15   -1.1        0.0
8764. HOCH2O=hocho+h                              1.00E+14    0.0    14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.12E+15   -0.3    11500.0
8765. hocho=co+h2o                                2.45E+12    0.0    60470.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.26E+03    2.1    52890.0
8766. hocho=co2+h2                                2.95E+09    0.0    48520.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.77E+05    1.0    51470.0
8767. ch2oh+hco=ch2o+ch2o                         1.80E+14    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.60E+14    0.5    59560.0
8768. ch2oh+ch3o=ch2o+ch3oh                       2.40E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.28E+13    0.6    74980.0
8769. oh+ch2oh=h2o+ch2o                           2.40E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.35E+12    0.7    89640.0
8770. ch2o+ch3oh=ch2oh+ch2oh                      6.50E+12    0.7    68460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.00E+12    0.0        0.0
8771. ch2oh+ho2=HOCH2O+oh                         1.00E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            8.17E+13    0.0    33470.0
8772. CH2O2H=ch2o+oh                              9.00E+14    0.0     1500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.87E+11    1.1    36840.0
8773. OCH2O2H=ch2o+ho2                            1.28E+18   -1.8    10460.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.50E+11    0.0    11900.0
8774. OCH2O2H=HOCH2O2                             3.00E+11    0.0     8600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            4.24E+08    0.9    26200.0
8775. HOCH2O2+ho2=HOCH2O2H+o2                     3.50E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.05E+14   -0.8    34870.0
8776. HOCH2O2H=HOCH2O+oh                          1.02E+21   -1.9    42490.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+13    0.0        0.0
8777. C+oh=co+h                                   5.00E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.36E+15    0.0   154300.0
8778. C+o2=co+o                                   5.00E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.07E+14    0.0   138200.0
8779. ch+h=C+h2                                   5.00E+13    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.04E+14    0.0    23820.0
8780. c2h5oh(+M)=ch3+ch2oh(+M)                    5.94E+23   -1.7    91163.0
    Low pressure limit:  0.28800E+86 -0.18900E+02  0.10991E+06
    TROE centering:      0.50000E+00  0.20000E+03  0.89000E+03  0.46000E+04
       h2o              Enhanced by    5.000E+00
       h2               Enhanced by    2.000E+00
       co2              Enhanced by    3.000E+00
       co               Enhanced by    2.000E+00
8781. c2h5oh(+M)=c2h5+oh(+M)                      1.25E+23   -1.5    96005.0
    Low pressure limit:  0.32520E+86 -0.18810E+02  0.11493E+06
    TROE centering:      0.50000E+00  0.30000E+03  0.90000E+03  0.50000E+04
       h2o              Enhanced by    5.000E+00
       h2               Enhanced by    2.000E+00
       co2              Enhanced by    3.000E+00
       co               Enhanced by    2.000E+00
8782. c2h5oh(+M)=c2h4+h2o(+M)                     2.79E+13    0.1    66136.0
    Low pressure limit:  0.25700E+84 -0.18850E+02  0.86452E+05
    TROE centering:      0.70000E+00  0.35000E+03  0.80000E+03  0.38000E+04
       h2o              Enhanced by    5.000E+00
```

```
8783. c2h5oh(+M)=ch3hco+h2(+M)                    7.24E+11    0.1    91007.0
    Low pressure limit:  0.44600E+88 -0.19420E+02  0.11559E+06
    TROE centering:      0.90000E+00  0.90000E+03  0.11000E+04  0.35000E+04
       h2o              Enhanced by    5.000E+00
8784. c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2                       2.00E+13    0.0    52800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.47E+08    0.3    -1105.0
8785. c2h5oh+o2=ch3choh+ho2                       1.50E+13    0.0    50150.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.08E+09    0.6     -504.0
8786. c2h5oh+c2h5=pc2h4oh+c2h6                    5.00E+10    0.0    13400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.00E+10    0.0    26990.0
8787. c2h5oh+c2h5=ch3choh+c2h6                    5.00E+10    0.0    10400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            7.00E+10    0.0        2.4
8788. c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o                       6.20E+03    2.7     -576.0
8789. c2h5oh+oh=ch3choh+h2o                       1.31E+05    2.4    -1457.0
8790. c2h5oh+oh=c2h5o+h2o                         2.81E+02    3.0     -580.0
8791. c2h5oh+h=pc2h4oh+h2                         1.88E+03    3.2     7150.0
8792. c2h5oh+h=ch3choh+h2                         1.79E+05    2.5     3420.0
8793. c2h5oh+h=c2h5o+h2                           5.55E-23   10.6    -4459.0
8794. c2h5oh+o=pc2h4oh+oh                         9.69E+02    3.2     4658.0
8795. c2h5oh+o=ch3choh+oh                         1.45E+05    2.4      876.0
8796. c2h5oh+o=c2h5o+oh                           1.46E-03    4.7     1727.0
8797. c2h5oh+ch3=pc2h4oh+ch4                      3.30E+02    3.3    12291.0
8798. c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4                      1.99E+01    3.4     7635.0
8799. c2h5oh+ch3=c2h5o+ch4                        2.04E+00    3.6     7722.0
8800. c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2                     8.20E+03    2.5    10750.0
8801. c2h5oh+ho2=pc2h4oh+h2o2                     1.23E+04    2.5    15750.0
8802. c2h5oh+ho2=c2h5o+h2o2                       2.50E+12    0.0    24000.0
8803. ch3choh+o2=ch3hco+ho2                       1.00E+13    0.0     5564.0
8804. ch3choh+ch3=c3h6+h2o                        1.00E+13    0.0        0.0
8805. ch3choh+o=ch3hco+oh                         1.00E+14    0.0        0.0
8806. ch3choh+h=c2h4+h2o                          3.00E+13    0.0        0.0
8807. ch3choh+h=ch3+ch2oh                         3.00E+13    0.0        0.0
8808. ch3choh+ho2=ch3hco+oh+oh                    4.00E+13    0.0        0.0
8809. ch3choh+oh=ch3hco+h2o                       5.00E+12    0.0        0.0
8810. ch3choh+M=ch3hco+h+M                        1.00E+14    0.0    25000.0
8811. c2h5o+h=ch3hco+h2                           1.00E+13    0.0        0.0
8812. c2h5o=ch3hco+h                              5.43E+15   -0.7    22230.0
8813. c2h5o=ch3+ch2o                              1.32E+20   -2.0    20750.0
8814. c2h5o+ho2=ch3hco+h2o2                       3.00E+11    0.0        0.0
8815. c2h5o+M=ch3hco+h+M                          1.16E+35   -5.9    25274.0
8816. c2h5o+M=ch3+ch2o+M                          1.35E+38   -7.0    23800.0
8817. c2h5o+o2=ch3hco+ho2                         4.00E+10    0.0     1100.0
8818. ch3choh+o2=c2h3oh+ho2                       6.90E+11    0.0    11660.0
8819. pc2h4oh+o2=c2h3oh+ho2                       1.58E+12    0.0    12370.0
8820. ch3choh+o2=c2h4ohqjB                        1.60E+19   -2.5        0.0
8821. pc2h4oh+o2=c2h4ohqjA                        8.00E+18   -2.5        0.0
8822. c2h4ohqjA=oh+hcoch2oh                       1.84E-02    4.8    34460.0
8823. c2h4ohqjA=c2h3ohqAjB                        1.76E-07    5.9    18110.0
8824. c2h4ohqjA=ho2+c2h3oh                        1.11E+10    1.4    32910.0
8825. c2h4ohqjA=c2h4oqA                           3.00E+09    0.8    22290.0
8826. c2h4ohqjB=c2h3ohjAqB                        6.40E-19    9.3    19820.0
8827. c2h4ohqjB=oh+ch3co2h                        1.08E+03    3.0    32999.0
8828. c2h4ohqjB=c2h4oqB                           1.74E+11    0.3    23170.0
8829. c2h4ohqjB=ch3hco+ho2                        4.91E+10    0.7    12440.0
8830. c2h4ohqjB=ho2+c2h3oh                        3.48E+07    1.8    30380.0
8831. c2h3ohqAjB=ho2+c2h3oh                       2.96E+12    0.3    15290.0
8832. c2h3ohqAjB=oh+c2h4o(oh)                     8.86E+11    0.2    12570.0
8833. c2h3ohqAjB=oh+2ch2o                         9.07E+11    0.7     6360.0
8834. c2h3ohqAjB+o2=c2h3ohqAqjB                   1.60E+19   -2.5        0.0
8835. c2h3ohqAqjB=>ho2+oh+ch2o+hco                1.67E+09    1.0    21700.0
8836. c2h3ohjAqB=ho2+c2h3oh                       2.10E+10    1.2    18260.0
8837. c2h3ohjAqB=oh+c2h4o(oh)                     6.43E+09    1.2    12200.0
8838. c2h4oqB=ho2+ch3hco                          8.94E+12    0.2    13420.0
8839. c2h4oqB=>ch3+oh+h+co2                       1.19E+12    0.6    10530.0
8840. c2h4oqB=oh+ch3co2h                          3.60E-05    5.3    15180.0
8841. c2h3oh=ch3hco                               1.01E+07    1.6    50986.0
8842. c2h3oh+h=ch2hco+h2                          4.20E+06    2.0     2400.0
8843. c2h3oh+oh=ch2hco+h2o                        1.10E+06    2.0    -1870.0
8844. c2h3oh+ch3=ch2hco+ch4                       1.00E+11    0.0     7900.0
8845. c2h3oh+ho2=ch2hco+h2o2                      1.00E+12    0.0    14000.0
8846. c2h3oh+o=ch2hco+oh                          1.00E+13    0.0     3280.0
8847. c2h4o(oh)+h=h2+ch2o+hco                     1.76E+12    0.0     4570.0
8848. c2h4o(oh)+oh=h2o+ch2o+hco                   1.14E+06    2.0      914.0
8849. c2h4o(oh)+ho2=h2o2+ch2o+hco                 1.00E+11    0.0    15500.0
8850. c2h4o(oh)+ch3=ch4+ch2o+hco                  8.00E+10    0.0     9400.0
8851. c2h4o(oh)+o=oh+ch2o+hco                     4.82E+13    0.0     6856.0
8852. ch3co2h=ch4+co2                             7.08E+13    0.0    74600.0
8853. ch3co2h+oh=ch3+co2+h2o                      2.40E+11    0.0     -400.0
8854. c4h10=c2h5+c2h5                             2.00E+16    0.0    81300.0
8855. c4h10=ch3+nc3h7                             1.00E+17    0.0    85400.0
8856. c4h10=pc4h9+h                               1.58E+16    0.0    98000.0
8857. c4h10=sc4h9+h                               1.00E+16    0.0    95000.0
8858. c4h10+o2=pc4h9+ho2                          2.51E+13    0.0    49000.0
8859. c4h10+h=pc4h9+h2                            5.63E+07    2.0     7700.0
8860. c4h10+o=pc4h9+oh                            4.89E+06    2.4     5505.0
8861. c4h10+oh=pc4h9+h2o                          4.14E+07    1.7      753.0
8862. c4h10+ho2=pc4h9+h2o2                        1.70E+13    0.0    20460.0
8863. c4h10+ch3=pc4h9+ch4                         2.19E+11    0.0    11400.0
8864. c4h10+c2h3=pc4h9+c2h4                       1.00E+12    0.0    18000.0
8865. c4h10+c2h5=pc4h9+c2h6                       1.00E+11    0.0    13400.0
8866. c4h10+ac3h5=pc4h9+c3h6                      7.94E+11    0.0    20500.0
8867. c4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh                      3.00E+11    0.0     7000.0
8868. c4h10+o2=sc4h9+ho2                          3.98E+13    0.0    47600.0
8869. c4h10+h=sc4h9+h2                            4.78E+06    2.5     7369.0
8870. c4h10+o=sc4h9+oh                            4.28E+05    2.6     2583.0
8871. c4h10+oh=sc4h9+h2o                          7.23E+07    1.6     -246.0
8872. c4h10+ho2=sc4h9+h2o2                        4.00E+12    0.0    18150.0
8873. c4h10+ch3=sc4h9+ch4                         2.19E+11    0.0     9600.0
8874. c4h10+c2h3=sc4h9+c2h4                       7.94E+11    0.0    16800.0
8875. c4h10+c2h5=sc4h9+c2h6                       1.00E+11    0.0    10400.0
8876. c4h10+ac3h5=sc4h9+c3h6                      3.16E+11    0.0    16400.0
8877. c4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh                      6.00E+11    0.0     7000.0
8878. pc4h9=c2h5+c2h4                             2.50E+13    0.0    28824.0
8879. sc4h9=ch3+c3h6                              2.00E+13    0.0    31000.0
8880. pc4h9=c3h6+ch3                              1.26E+12    0.0    27026.0
8881. pc4h9=c4h8+h                                1.26E+13    0.0    38600.0
8882. sc4h9=t2c4h8+h                              4.57E+12    0.0    34000.0
8883. sc4h9=c2c4h8+h                              4.17E+12    0.0    34780.0
8884. pc4h9+o2=c4h8+ho2                           1.90E+12    0.0     5000.0
8885. sc4h9+o2=c4h8+ho2                           7.59E+09    0.0    -2000.0
8886. sc4h9+o2=t2c4h8+ho2                         9.00E+09    0.0    -2000.0
8887. sc4h9+o2=c2c4h8+ho2                         9.00E+09    0.0    -2000.0
8888. pc4h9=sc4h9                                 1.39E+09    1.0    33760.0
8889. pc4h9+ho2=c4h8+h2o2                         2.41E+13    0.0        0.0
8890. pc4h9+oh=c4h8+h2o                           2.40E+13    0.0        0.0
8891. pc4h9+h=c4h8+h2                             1.25E+13    0.0        0.0
8892. pc4h9+ch3=c4h8+ch4                          2.00E+12    0.0        0.0
8893. pc4h9+c2h5=c4h8+c2h6                        1.60E+12    0.0        0.0
8894. pc4h9+ac3h5=c4h8+c3h6                       1.00E+12    0.0        0.0
8895. sc4h9+ho2=c4h8+h2o2                         2.40E+13    0.0        0.0
8896. sc4h9+ho2=t2c4h8+h2o2                       2.40E+13    0.0        0.0
8897. sc4h9+ho2=c2c4h8+h2o2                       2.40E+13    0.0        0.0
```

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 8898. | sc4h9+oh=c4h8+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8899. | sc4h9+oh=t2c4h8+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8900. | sc4h9+oh=c2c4h8+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8901. | sc4h9+h=c4h8+h2 | 3.33E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8902. | sc4h9+h=t2c4h8+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8903. | sc4h9+h=c2c4h8+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8904. | sc4h9+ch3=c4h8+ch4 | 8.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 8905. | sc4h9+ch3=t2c4h8+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8906. | sc4h9+ch3=c2c4h8+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8907. | pc4h9+o2=c4h9qjA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 8908. | sc4h9+o2=c4h9qjB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 8909. | c4h9qjA=c4h8rBqA | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 8910. | c4h9qjA=c4h8rCqA | 5.70E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 8911. | c4h9qjA=c4h8rDqA | 1.50E+08 | 1.0 | 25000.0 |
| 8912. | c4h9qjB=c4h8rDqB | 8.60E+08 | 1.0 | 28000.0 |
| 8913. | c4h9qjB=c4h8rAqB | 5.00E+09 | 1.0 | 35500.0 |
| 8914. | c4h9qjB=c4h8rCqB | 3.30E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 8915. | c4h9qjA+ho2=nc4h9o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 8916. | c4h9qjB+ho2=nc4h9o2h+o2 | 2.90E+11 | 0.0 | 1550.0 |
| 8917. | nc4h9o2h=>oh+ch3hco+c2h5 | 1.50E+16 | 0.0 | 42000.0 |
| 8918. | c4h8rDqA=c2h4+c2h4o2h | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 |
| 8919. | c4h8rDqA=c4h8rAqA | 5.70E+08 | 1.0 | 15300.0 |
| 8920. | c4h8rDqB=c4h8rAqB | 8.60E+08 | 1.0 | 19800.0 |
| 8921. | c4h8rAqA+o2=c4h8qjAqA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 8922. | c4h8rBqA+o2=c4h8qjBqA | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 8923. | c4h8rCqA+o2=c4h8qjCqA | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 8924. | c4h8rDqA+o2=c4h8qjDqA | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 8925. | c4h8rAqB+o2=c4h8qjAqB | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 8926. | c4h8rCqB+o2=c4h8qjCqB | 1.70E+19 | -2.5 | 0.0 |
| 8927. | c4h8rDqB+o2=c4h8qjDqB | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 8928. | c4h8rCqA=>oh+ch2o+c3h6 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 8929. | c4h8rDqB=>oh+ch3hco+c2h4 | 5.00E+13 | 0.0 | 25500.0 |
| 8930. | c4h8rAqA=oh+nc3h7hco | 1.00E+09 | 0.0 | 7500.0 |
| 8931. | c4h8rBqA=oh+c4h8o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 8932. | c4h8rCqA=oh+c4h8o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 8933. | c4h8rDqA=oh+c4h8o#5 | 2.10E+08 | 0.0 | 6500.0 |
| 8934. | c4h8rAqB=oh+c4h8o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 8935. | c4h8rCqB=oh+c4h8o#3 | 6.10E+11 | 0.0 | 17950.0 |
| 8936. | c4h8rDqB=oh+c4h8o#4 | 9.20E+10 | 0.0 | 16600.0 |
| 8937. | c4h8rBqA=ho2+c4h8 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 8938. | c4h8rAqB=ho2+c4h8 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 8939. | c4h8rCqB=ho2+c4h8 | 8.50E+12 | 0.0 | 26000.0 |
| 8940. | c4h8qjBqA=oh+c4h7oAqB | 2.68E+12 | 0.0 | 30500.0 |
| 8941. | c4h8qjCqA=oh+c4h7oAqC | 4.60E+11 | 0.0 | 23000.0 |
| 8942. | c4h8qjDqA=oh+c4h7oAqD | 7.90E+10 | 0.0 | 20000.0 |
| 8943. | c4h8qjAqB=oh+c4h7oBqA | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 8944. | c4h8qjCqB=oh+c4h7oBqC | 1.34E+12 | 0.0 | 27500.0 |
| 8945. | c4h8qjDqB=oh+c4h7oBqD | 2.30E+11 | 0.0 | 20000.0 |
| 8946. | c4h7oAqB=>oh+hco+c2h5hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 8947. | c4h7oAqC=>oh+ch2hco+ch3hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 8948. | c4h7oAqD=>oh+ch2o+ch2ch2hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 8949. | c4h7oBqA=>oh+ch2o+c2h5co | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 8950. | c4h7oBqC=>oh+ch3co+ch3hco | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 8951. | c4h7oBqD=>oh+ch2o+ch2coch3 | 7.50E+15 | 0.0 | 44500.0 |
| 8952. | c4h8o#3+h=>h2+ch2co+c2h5 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 8953. | c4h8o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 8954. | c4h8o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 8955. | c4h8o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 8956. | c4h8o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 8957. | c4h8o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 8958. | c4h8o#3+o=>oh+ch2hco+c2h4 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 8959. | c4h8o#4+h=>h2+ch3chch2hco | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 8960. | c4h8o#4+h=>h2+ch3coc2h4p | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 8961. | c4h8o#4+oh=>h2o+ch3chch2hco | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 8962. | c4h8o#4+oh=>h2o+ch3coc2h4p | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 8963. | c4h8o#4+ho2=>h2o2+ch3chch2hco | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 8964. | c4h8o#4+ho2=>h2o2+ch3coc2h4p | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 8965. | c4h8o#4+ch3=>ch4+ch3chch2hco | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 8966. | c4h8o#4+ch3=>ch4+ch3coc2h4p | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 8967. | c4h8o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch3chch2hco | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 8968. | c4h8o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch3coc2h4p | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 8969. | c4h8o#4+c2h5=>c2h6+ch3chch2hco | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 8970. | c4h8o#4+c2h5=>c2h6+ch3coc2h4p | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 8971. | c4h8o#4+o=>oh+ch3chch2hco | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 8972. | c4h8o#4+o=>oh+ch3coc2h4p | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 8973. | c4h8o#5+h=h2+c3h6hco-1 | 2.70E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 8974. | c4h8o#5+oh=h2o+c3h6hco-1 | 7.80E+06 | 2.0 | -765.0 |
| 8975. | c4h8o#5+ho2=h2o2+c3h6hco-1 | 1.20E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 8976. | c4h8o#5+ch3=ch4+c3h6hco-1 | 6.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 8977. | c4h8o#5+ch3o2=ch3o2h+c3h6hco-1 | 4.50E+12 | 0.0 | 17500.0 |
| 8978. | c4h8o#5+c2h5=c2h6+c3h6hco-1 | 6.00E+11 | 0.0 | 11000.0 |
| 8979. | c4h8o#5+o=oh+c3h6hco-1 | 7.80E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 8980. | c2c4h8=c4h6+h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 65500.0 |
| 8981. | sc4h9=c4h8+h | 2.00E+13 | 0.0 | 40400.0 |
| 8982. | c4h8+oh=ch2o+nc3h7 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8983. | c4h8+oh=ch3hco+c2h5 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8984. | c4h8+oh=c2h5hco+ch3 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8985. | c4h8+oh=ch3co+c2h6 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 8986. | c4h8+oh=c2h5co+ch4 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 8987. | t2c4h8+oh=ch3hco+c2h5 | 2.60E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8988. | c2c4h8+oh=ch3hco+c2h5 | 2.60E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 8989. | c4h8+o=c3h6+ch2o | 7.23E+05 | 2.3 | -1050.0 |
| 8990. | c4h8+o=ch3hco+c2h4 | 1.30E+13 | 0.0 | 850.0 |
| 8991. | c4h8+o=c2h5+ch3co | 1.62E+13 | 0.0 | 850.0 |
| 8992. | c2c4h8+o=ic3h7+hco | 6.03E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8993. | c2c4h8+o=ch3hco+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8994. | t2c4h8+o=ic3h7+hco | 6.03E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8995. | t2c4h8+o=ch3hco+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 8996. | c4h8+ho2=>ch2o+c3h6+oh | 2.50E+12 | 0.0 | 14340.0 |
| 8997. | c4h8+o2=Cc4h7-1+ho2 | 4.00E+12 | 0.0 | 40000.0 |
| 8998. | c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2 | 6.80E+03 | 2.5 | 10115.0 |
| 8999. | c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o | 4.19E+06 | 2.0 | -543.0 |
| 9000. | c4h8+o=Cc4h7-1+oh | 2.60E+12 | 0.0 | 4500.0 |
| 9001. | c4h8+h=Cc4h7-1+h2 | 1.95E+13 | 0.0 | 4445.0 |
| 9002. | c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 9003. | c4h8+c2h5=Cc4h7-1+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 9004. | c4h8+ac3h5=Cc4h7-1+c3h6 | 8.00E+10 | 0.0 | 12400.0 |
| 9005. | c4h8+sc3h5=Cc4h7-1+c3h6 | 8.00E+10 | 0.0 | 12400.0 |
| 9006. | c4h8+tc3h5=Cc4h7-1+c3h6 | 8.00E+10 | 0.0 | 12400.0 |
| 9007. | c4h8+o2=Dc4h7-1+ho2 | 1.26E+13 | 0.0 | 49000.0 |
| 9008. | c4h8+h=Dc4h7-1+h2 | 2.82E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 9009. | c4h8+o=Dc4h7-1+oh | 2.44E+06 | 2.4 | 5505.0 |
| 9010. | c4h8+oh=Dc4h7-1+h2o | 2.07E+07 | 1.7 | 753.0 |
| 9011. | c4h8+ho2=Dc4h7-1+h2o2 | 8.50E+12 | 0.0 | 20460.0 |
| 9012. | c4h8+ch3=Dc4h7-1+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 9013. | c4h8+c2h5=Dc4h7-1+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 9014. | c4h8+ch3o=Dc4h7-1+ch3oh | 1.50E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 9015. | c2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o | 9.00E+06 | 2.0 | -60.0 |
| 9016. | c2c4h8+h=Cc4h7-1+h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 3500.0 |
| 9017. | c2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 8200.0 |
| 9018. | t2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o | 9.00E+06 | 2.0 | -60.0 |
| 9019. | t2c4h8+h=Cc4h7-1+h2 | 5.00E+12 | 0.0 | 3500.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 9020. | t2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 8200.0 |
| 9021. | c4h8=c2c4h8 | 4.00E+11 | 0.0 | 60000.0 |
| 9022. | c4h8=t2c4h8 | 4.00E+11 | 0.0 | 60000.0 |
| 9023. | c2c4h8=t2c4h8 | 3.62E+13 | 0.0 | 61330.0 |
| 9024. | c4h8=ac3h5+ch3 | 1.50E+19 | -1.0 | 73400.0 |
| 9025. | c4h8=c2h3+c2h5 | 1.00E+19 | -1.0 | 96770.0 |
| 9026. | c2c4h8=sc3h5+ch3 | 2.00E+16 | 0.0 | 71300.0 |
| 9027. | t2c4h8=sc3h5+ch3 | 2.00E+16 | 0.0 | 71300.0 |
| 9028. | c4h8=Cc4h7-1+h | 4.08E+18 | -1.0 | 97350.0 |
| 9029. | c2c4h8=Cc4h7-1+h | 4.07E+18 | -1.0 | 97350.0 |
| 9030. | t2c4h8=Cc4h7-1+h | 4.07E+18 | -1.0 | 97350.0 |
| 9031. | Dc4h7-1=c2h4+c2h3 | 5.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 9032. | Dc4h7-1=c4h6+h | 1.00E+14 | 0.0 | 44000.0 |
| 9033. | Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2 | 1.02E+12 | 0.0 | 22654.0 |
| 9034. | Dc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9035. | Dc4h7-1+oh=c4h6+h2o | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9036. | Dc4h7-1+o=c4h6+oh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9037. | Dc4h7-1+h=c4h6+h2 | 3.16E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9038. | Dc4h7-1+ch3=c4h6+ch4 | 7.94E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9039. | Dc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9040. | Dc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9041. | Dc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 9042. | Dc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 9043. | Dc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 9044. | Dc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9045. | Dc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9046. | Dc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6 | 6.30E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9047. | Dc4h7-1+Dc4h7-1=c4h6+c4h8 | 3.16E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9048. | Dc4h7-1+c2h4=c4h8+c2h3 | 1.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 9049. | Dc4h7-1+c3h6=c4h8+ac3h5 | 1.00E+11 | 0.0 | 9800.0 |
| 9050. | Dc4h7-1+c4h8=c4h8+Cc4h7-1 | 1.00E+11 | 0.0 | 8300.0 |
| 9051. | Dc4h7-1+t2c4h8=c4h8+Cc4h7-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 9800.0 |
| 9052. | Dc4h7-1+c2c4h8=c4h8+Cc4h7-1 | 2.00E+11 | 0.0 | 9800.0 |
| 9053. | c4h6+Dc4h7-1=nc4h5+c4h8 | 6.32E+02 | 3.1 | 20010.0 |
| 9054. | c4h6+Dc4h7-1=ic4h5+c4h8 | 6.32E+02 | 3.1 | 18010.0 |
| 9055. | Dc4h7-1+ho2=ac3h5+ch2o+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9056. | Dc4h7-1+ch3o2=ac3h5+ch3o+ch2o | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9057. | Dc4h7-1+c2h5o2=ac3h5+c2h5o+ch2o | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9058. | Cc4h7-1+o2=c4h6+ho2 | 1.02E+12 | 0.0 | 22654.0 |
| 9059. | Cc4h7-1=c4h6+h | 1.20E+14 | 0.0 | 49300.0 |
| 9060. | Cc4h7-1=c2h4+c2h3 | 1.00E+14 | 0.0 | 49000.0 |
| 9061. | Cc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9062. | Cc4h7-1+oh=c4h6+h2o | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9063. | Cc4h7-1+o=c4h6+oh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9064. | Cc4h7-1+h=c4h6+h2 | 3.16E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9065. | Cc4h7-1+ch3=c4h6+ch4 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9066. | Cc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9067. | Cc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9068. | Cc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 9069. | Cc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 9070. | Cc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 9071. | Cc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9072. | Cc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9073. | Cc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6 | 6.30E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9074. | Cc4h7-1+ac3h5=c4h8+ac3h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9075. | Cc4h7-1+ac3h5=>mhd | 3.20E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 9076. | Cc4h7-1+Cc4h7-1=c4h6+c4h8 | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9077. | Cc4h7-1+ho2=>acrol+ch3+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 9078. | Cc4h7-1+ch3o2=>acrol+ch3+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 9079. | Cc4h7-1+c2h5o2=>acrol+ch3+c2h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 9080. | c3h3+ch3=butyne | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9081. | butyne+ho2=nc4h5+h2o2 | 5.00E+11 | 0.0 | 17000.0 |
| 9082. | butyne+ho2=ic4h5+h2o2 | 5.00E+11 | 0.0 | 17000.0 |
| 9083. | butyne+oh=nc4h5+h2o | 2.60E+02 | 3.0 | 200.0 |
| 9084. | butyne+oh=ic4h5+h2o | 2.60E+02 | 3.0 | 200.0 |
| 9085. | butyne+oh=ch2co+c2h5 | 4.00E-04 | 4.5 | -1000.0 |
| 9086. | butyne+o=c3h6+co | 2.00E+13 | 0.0 | 1660.0 |
| 9087. | butyne+h=ac3h4+ch3 | 1.30E+05 | 2.5 | 1000.0 |
| 9088. | butyne+h=c2h5+c2h2 | 6.50E+04 | 2.5 | 1000.0 |
| 9089. | butyne+h=ic4h5+h2 | 6.50E+13 | 0.0 | 9400.0 |
| 9090. | butyne+h=nc4h5+h2 | 6.50E+13 | 0.0 | 9400.0 |
| 9091. | butyne+ch3=ic4h5+ch4 | 1.00E+14 | 0.0 | 19500.0 |
| 9092. | butyne+ch3=nc4h5+ch4 | 1.00E+14 | 0.0 | 19500.0 |
| 9093. | butyn2=c4h6 | 3.00E+13 | 0.0 | 65000.0 |
| 9094. | butyn2=meall | 3.00E+13 | 0.0 | 67000.0 |
| 9095. | butyn2+h=pc3h4+ch3 | 2.60E+05 | 2.5 | 1000.0 |
| 9096. | butyne=meall | 2.50E+13 | 0.0 | 65000.0 |
| 9097. | meall=c4h6 | 2.50E+13 | 0.0 | 63000.0 |
| 9098. | meall=c3h3+ch3 | 2.00E+15 | 0.0 | 75000.0 |
| 9099. | meall+h=ac3h4+ch3 | 6.00E+12 | 0.0 | 2100.0 |
| 9100. | meall+h=pc3h4+ch3 | 6.00E+12 | 0.0 | 2100.0 |
| 9101. | meall+oh=ic4h5+h2o | 2.00E+07 | 2.0 | 1000.0 |
| 9102. | meall+h=ic4h5+h2 | 5.00E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 9103. | ic3h7+c2h2=c4h6+ch3 | 2.77E+10 | 0.0 | 6504.0 |
| 9104. | c4h6=c2h4+c2h2 | 1.00E+14 | 0.0 | 75000.0 |
| 9105. | c4h6=nc4h5+h | 1.58E+16 | 0.0 | 110000.0 |
| 9106. | c4h6+o2=nc4h5+ho2 | 2.80E+13 | 0.0 | 62500.0 |
| 9107. | c4h6+o2=ic4h5+ho2 | 1.40E+12 | 0.0 | 50600.0 |
| 9108. | c4h6+ho2=nc4h5+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 9109. | c4h6+ho2=ic4h5+h2o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 9920.0 |
| 9110. | c4h6+oh=nc4h5+h2o | 1.00E+07 | 2.0 | 7253.0 |
| 9111. | c4h6+oh=ic4h5+h2o | 8.00E+06 | 2.0 | 3744.0 |
| 9112. | c4h6+o=ic4h5+oh | 4.53E+15 | -0.5 | 7028.0 |
| 9113. | c4h6+o=nc4h5+oh | 2.27E+15 | -0.5 | 7028.0 |
| 9114. | c4h6+h=pc3h4+ch3 | 1.30E+03 | 2.5 | 1000.0 |
| 9115. | c4h6+h=ac3h4+ch3 | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| 9116. | c4h6+h=nc4h5+h2 | 5.00E+15 | 0.0 | 22800.0 |
| 9117. | c4h6+h=ic4h5+h2 | 2.50E+15 | 0.0 | 22800.0 |
| 9118. | c4h6+ch3=nc4h5+ch4 | 2.00E+14 | 0.0 | 24800.0 |
| 9119. | c4h6+ch3=ic4h5+ch4 | 4.00E+14 | 0.0 | 22800.0 |
| 9120. | c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4 | 6.32E+02 | 3.1 | 20010.0 |
| 9121. | c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4 | 6.32E+02 | 3.1 | 18010.0 |
| 9122. | c4h6+Cc4h7-1=nc4h5+c4h8 | 6.32E+02 | 3.1 | 20010.0 |
| 9123. | c4h6+Cc4h7-1=ic4h5+c4h8 | 6.32E+02 | 3.1 | 18010.0 |
| 9124. | c4h6+oh=ch3hco+c2h3 | 5.60E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 9125. | c4h6+o=>ac3h5hco | 3.00E+13 | 0.0 | 80.0 |
| 9126. | c4h6+ho2=>c4h6o2h | 2.00E+11 | 0.0 | 8000.0 |
| 9127. | c4h6o2h=>acrol+oh+ch2 | 1.00E+10 | 0.0 | 19500.0 |
| 9128. | c4h6o2h=>ac3h5hco+oh | 2.00E+11 | 0.0 | 19500.0 |
| 9129. | c2h3chcho+o=acrol+hco | 2.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 9130. | c2h3chcho+ho2=oh+acrol+hco | 2.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 9131. | ac3h5hco=>c3h6+co | 2.00E+13 | 0.0 | 57000.0 |
| 9132. | ac3h5hco=>c2h4+ch2co | 5.00E+14 | 1.0 | 78000.0 |
| 9133. | ac3h5hco+o=>c2h3o+c2h3o | 1.20E+08 | 1.4 | 530.0 |
| 9134. | ac3h5hco+oh=>ch2co+c2h3+h2o | 2.02E+13 | 0.0 | 5955.0 |
| 9135. | ac3h5hco+ho2=>c2h3o+c2h3o+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 14964.0 |
| 9136. | ac3h5hco+h=>ac3h5co+h2 | 4.10E+09 | 1.2 | 2405.0 |
| 9137. | ac3h5hco+oh=>ac3h5co+h2o | 2.35E+10 | 0.7 | -1113.0 |
| 9138. | ac3h5hco+ho2=>ac3h5co+h2o2 | 1.70E+12 | 0.0 | 10700.0 |
| 9139. | ac3h5hco+o=>ac3h5co+oh | 5.85E+12 | 0.0 | 1808.0 |
| 9140. | ac3h5hco+ch3=>ac3h5co+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 9141. | ac3h5hco+c2h3=>ac3h5co+c2h4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 9142. | ac3h5hco+ac3h5=>ac3h5co+c3h6 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 9143. | ac3h5hco+oh=c2h3chcho+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| 9144. | ac3h5hco+ho2=c2h3chcho+h2o2 | 9.63E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 9145. | ac3h5hco+ch3o2=c2h3chcho+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| 9146. | ac3h5co+h=>ac3h5hco | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9147. | ac3h5co+o2=>acrol+co+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 25000.0 |
| 9148. | ac3h5co=>ch2co+c2h3 | 1.00E+15 | 0.0 | 65000.0 |
| 9149. | ac3h5co=>co+c2h2+ch3 | 5.00E+14 | 0.0 | 65000.0 |
| 9150. | ac3h5co=>ac3h5+co | 6.20E+15 | -1.1 | -330.0 |
| 9151. | c2h3+c2h3=ic4h5+h | 7.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9152. | ic4h5+h=ch3+c3h3 | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 9153. | ic4h5+o2=c2h3co+ch2o | 2.00E+11 | 0.0 | 14000.0 |
| 9154. | ic4h5+o=>ch2co+c2h3 | 1.00E+13 | 0.0 | 2000.0 |
| 9155. | ic4h5+ho2=ch2co+c2h3+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 2000.0 |
| 9156. | ic4h5+ho2=>ac3h5co+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 2000.0 |
| 9157. | c3h6+ic4h5=ac3h5+c4h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 9800.0 |
| 9158. | ic4h5+c2h2=c4h6+c2h | 1.80E+11 | 0.0 | 17300.0 |
| 9159. | ic4h5+ch2o=c4h6+hco | 4.00E+12 | 0.0 | 8840.0 |
| 9160. | nc4h5=c2h3+c2h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 44000.0 |
| 9161. | nc4h5+o2=acrol+hco | 2.00E+11 | 0.0 | 14000.0 |
| 9162. | nc4h5+o=>ac3h5+co | 1.00E+13 | 0.0 | 2000.0 |
| 9163. | nc4h5+oh=c4h4+h2o | 2.00E+07 | 2.0 | 1000.0 |
| 9164. | nc4h5+ho2=>ac3h5+co+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9165. | nc4h5+h=c4h4+h2 | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 9166. | nc4h5+h=ic4h5+h | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 9167. | nc4h5+c2h2=c4h6+c2h | 1.80E+11 | 0.0 | 17300.0 |
| 9168. | nc4h5+ch2o=c4h6+hco | 4.00E+12 | 0.0 | 8840.0 |
| 9169. | c3h6+nc4h5=ac3h5+c4h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 9800.0 |
| 9170. | c4h4=c2h2+c2h2 | 3.20E+13 | 0.0 | 77100.0 |
| 9171. | c4h4+m=nc4h3+h+m | 1.00E+20 | 0.0 | 99300.0 |
| 9172. | c4h4=ic4h3+h | 6.30E+13 | 0.0 | 87100.0 |
| 9173. | c4h4=c4h2+h2 | 1.26E+15 | 0.0 | 94700.0 |
| 9174. | c4h4+o2=nc4h3+ho2 | 1.00E+13 | 0.0 | 63200.0 |
| 9175. | c4h4+o2=ic4h3+ho2 | 1.00E+13 | 0.0 | 44640.0 |
| 9176. | c4h4+ho2=nc4h3+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 12600.0 |
| 9177. | c4h4+ho2=ic4h3+h2o2 | 1.00E+11 | 0.0 | 9920.0 |
| 9178. | c4h4+ho2=c3h3+hco+oh | 4.00E+11 | 0.0 | 8000.0 |
| 9179. | c4h4+oh=ic4h3+h2o | 2.00E+07 | 2.0 | 2000.0 |
| 9180. | c4h4+oh=nc4h3+h2o | 7.50E+06 | 2.0 | 5000.0 |
| 9181. | c4h4+o=ac3h4+co | 3.00E+13 | 0.0 | 1810.0 |
| 9182. | c4h4+h=ic4h3+h2 | 3.33E+05 | 2.5 | 9240.0 |
| 9183. | c4h4+h=nc4h3+h2 | 2.00E+07 | 2.0 | 15000.0 |
| 9184. | c4h4+c2h=ic4h3+c2h2 | 3.98E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9185. | c4h4+ch3=ic4h3+ch4 | 1.66E+01 | 3.7 | 9499.0 |
| 9186. | c4h4+nc4h5=ic4h3+c4h6 | 4.00E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 9187. | c4h4+ic4h5=ic4h3+c4h6 | 4.00E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 9188. | c2h2+c2h2=ic4h3+h | 6.31E+13 | 0.0 | 41600.0 |
| 9189. | ic4h3+o2=ch2co+hcco | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9190. | ic4h3+oh=c4h2+h2o | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9191. | ic4h3+o=ch2co+c2h | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9192. | ic4h3+o=h2c4o+h | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9193. | ic4h3+h=c4h2+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9194. | ic4h3+ch2=ac3h4+c2h | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9195. | nc4h3+oh=c4h2+h2o | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9196. | nc4h3+h=c4h2+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9197. | nc4h3+h=ic4h3+h | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 9198. | c2h2+c2h=c4h2+h | 1.82E+14 | 0.0 | 467.0 |
| 9199. | c4h2+m=c4h+h+m | 3.50E+17 | 0.0 | 80065.0 |
| 9200. | c4h2+oh=h2c4o+h | 6.66E+12 | 0.0 | -410.0 |
| 9201. | h2c4o+oh=ch2co+hcco | 1.00E+07 | 2.0 | 2000.0 |
| 9202. | h2c4o+h=c2h2+hcco | 5.00E+13 | 0.0 | 3000.0 |
| 9203. | c4h2+o=c3h2+co | 1.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9204. | c4h+o2=c2h+co+co | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 9205. | hco+nc3h7=nc3h7hco | 5.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 9206. | nc3h7hco+h=h2+nc3h7co | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 9207. | nc3h7hco+oh=h2o+nc3h7co | 4.20E+12 | 0.0 | 500.0 |
| 9208. | nc3h7hco+ho2=h2o2+nc3h7co | 1.00E+12 | 0.0 | 10000.0 |
| 9209. | nc3h7hco+ch3=ch4+nc3h7co | 2.00E-06 | 5.6 | 2500.0 |
| 9210. | nc3h7hco+c2h5=c2h6+nc3h7co | 1.30E+12 | 0.0 | 8500.0 |
| 9211. | nc3h7hco+oh=c3h6hco-1+h2o | 5.27E+09 | 1.0 | 1586.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.09E+09 | 1.0 | 21020.0 |
| 9212. | nc3h7hco+ho2=c3h6hco-1+h2o2 | 9.03E-01 | 3.6 | 7153.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.11E+00 | 3.3 | -487.4 |
| 9213. | nc3h7hco+ch3o2=c3h6hco-1+ch3o2h | 6.03E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.04E+13 | -0.5 | 6628.0 |
| 9214. | nc3h7co+M=co+nc3h7+M | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 9215. | nc3h7co+ho2=>co2+oh+nc3h7 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 9216. | nc3h7co+o2=c3h7co3 | 1.20E+11 | 0.0 | -1100.0 |
| 9217. | c3h7co3+ho2=c3h7co3h+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| 9218. | c3h7co3h=c3h7co2+oh | 5.01E+14 | 0.0 | 40150.0 |
| 9219. | nc3h7+co2=c3h7co2 | 1.00E+11 | 0.0 | 39360.0 |
| 9220. | c2h5coch2=ch2co+c2h5 | 1.57E+13 | 0.0 | 30000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.11E+11 | 0.0 | 7350.0 |
| 9221. | c2h5coch2+o2=c2h5coch2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 9222. | c2h5coch2o2+ho2=c2h5coch2o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 9223. | c2h5coch2o2h=c2h5coch2o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 9224. | ch2o+c2h5co=c2h5coch2o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 9225. | ch3coc2h4p=c2h4+ch3co | 5.97E+12 | 0.0 | 20730.0 |
| 9226. | ch3coc2h4p+o2=ch3coc2h4o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 9227. | ch3coc2h4o2+ho2=ch3coc2h4o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 9228. | ch3coc2h4o2h=ch3coc2h4o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 |
| 9229. | ch2o+ch2coch3=ch3coc2h4o | 1.50E+11 | 0.0 | 11900.0 |
| 9230. | ch3coc2h4p+o2=mvk+ho2 | 3.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 9231. | c2h4+ch2hco=c3h6hco-1 | 2.11E+11 | 0.0 | 7350.0 |
| 9232. | c3h6hco-1+o2=ac3h5hco+ho2 | 3.80E+10 | 0.0 | -2000.0 |
| 9233. | ch3chch2hco+o2=ac3h5hco+ho2 | 7.59E+09 | 0.0 | -2000.0 |
| 9234. | ch3chch2hco=c3h6+hco | 8.25E+12 | -0.2 | 21900.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+11 | 0.0 | 6000.0 |
| 9235. | mvk+oh=>ch2o+ch2coch3 | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 9236. | mvk+oh=>ch3+ch3cocho | 1.40E+12 | 0.0 | -900.0 |
| 9237. | c2h3+ch2co=ch2coc2h3 | 2.11E+11 | 0.0 | 7350.0 |
| 9238. | ch2+c3h8=ch3+ic3h7 | 2.19E+12 | 0.0 | 6405.0 |
| 9239. | ch2+c3h8=ch3+nc3h7 | 1.79E+12 | 0.0 | 6405.0 |
| 9240. | ch3+c2h5(+m)=c3h8(+m) | 4.90E+14 | -0.5 | 0.0 |
| | Low pressure limit: 0.68000E+62 -0.13420E+02 0.60000E+04 | | | |
| | TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+04 0.14340E+04 0.53290E+04 | | | |
| 9241. | c3h8+o2=nc3h7+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 50872.0 |
| 9242. | c3h8+o2=ic3h7+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47500.0 |
| 9243. | c3h8+ho2=nc3h7+h2o2 | 4.76E+04 | 2.5 | 16494.0 |
| 9244. | c3h8+ho2=ic3h7+h2o2 | 9.64E+03 | 2.6 | 13910.0 |
| 9245. | c3h8+oh=nc3h7+h2o | 3.16E+07 | 1.8 | 934.0 |
| 9246. | c3h8+oh=ic3h7+h2o | 7.08E+06 | 1.9 | -159.0 |
| 9247. | c3h8+o=nc3h7+oh | 3.72E+06 | 2.4 | 5505.0 |
| 9248. | c3h8+o=ic3h7+oh | 5.50E+05 | 2.5 | 3140.0 |
| 9249. | c3h8+h=nc3h7+h2 | 1.34E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| 9250. | c3h8+h=ic3h7+h2 | 1.01E+04 | 2.9 | 2931.0 |
| 9251. | c3h8+ch3=nc3h7+ch4 | 3.00E+12 | 0.0 | 11710.0 |
| 9252. | c3h8+ch3=ic3h7+ch4 | 8.07E+11 | 0.0 | 10110.0 |
| 9253. | c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6 | 3.16E+11 | 0.0 | 12300.0 |
| 9254. | c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6 | 5.01E+10 | 0.0 | 10400.0 |
| 9255. | c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4 | 6.00E+02 | 3.3 | 10502.0 |
| 9256. | c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4 | 1.00E+03 | 3.1 | 8829.0 |

```
9257. c3h8+ic3h7=nc3h7+c3h8                        1.00E+11    0.0    12900.0
9258. c3h8+ac3h5=nc3h7+c3h6                        7.94E+11    0.0    20500.0
9259. c3h8+ac3h5=ic3h7+c3h6                        7.94E+11    0.0    16200.0
9260. c3h8+ch3o=nc3h7+ch3oh                        3.18E+11    0.0     7050.0
9261. c3h8+ch3o=ic3h7+ch3oh                        7.20E+10    0.0     4470.0
9262. ic3h7=c2h4+ch3                               1.14E+11    0.0    31110.0
9263. nc3h7=c2h4+ch3                               1.50E+13    0.0    30404.0
9264. c3h6+h(+m)=nc3h7(+m)                         1.33E+13    0.0     3260.7
    Low pressure limit:  0.62600E+39 -0.66600E+01  0.70000E+03
    TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+04  0.13100E+04  0.48097E+05
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9265. c3h6+h(+m)=ic3h7(+m)                         5.70E+09    1.2      874.0
    Low pressure limit:  0.16400E+55 -0.11100E+02  0.93640E+04
    TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E-14  0.26000E+03  0.30000E+04
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9266. nc3h7+o2=c3h6+ho2                            1.00E+12    0.0     5020.0
9267. ic3h7+o2=c3h6+ho2                            2.75E+10    0.0    -2151.0
9268. oh+ic3h7=nc3h7oh                             5.90E+12    0.0        0.0
9269. ho2+ic3h7=nc3h7o2h                           4.80E+12    0.0        0.0
9270. nc3h7o2=nc3h7+o2                             3.87E+18   -1.2    36080.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.52E+12    0.0        0.0
9271. ic3h7o2=ic3h7+o2                             4.21E+16   -0.3    35910.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             7.54E+12    0.0        0.0
9272. nc3h7+h=c2h5+ch3                             1.00E+14    0.0        0.0
9273. ic3h7+h=c2h5+ch3                             5.00E+13    0.0        0.0
9274. ic3h7+h=c3h6+h2                              3.61E+12    0.0        0.0
9275. ic3h7+o=aceton+h                             4.82E+13    0.0        0.0
9276. ic3h7+o=ch3hco+ch3                           4.82E+13    0.0        0.0
9277. ch3o2+nc3h7=ch3o+nc3h7o                      1.90E+12    0.0    -1200.0
9278. ic3h7o2+nc3h7=ic3h7o+nc3h7o                  1.90E+12    0.0    -1200.0
9279. nc3h7o2+nc3h7=nc3h7o+nc3h7o                  1.90E+12    0.0    -1200.0
9280. nc3h7+ho2=nc3h7o+oh                          1.90E+12    0.0    -1200.0
9281. ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o                      1.90E+12    0.0    -1200.0
9282. ic3h7o2+ic3h7=ic3h7o+ic3h7o                  1.90E+12    0.0    -1200.0
9283. nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o                  1.90E+12    0.0    -1200.0
9284. ic3h7+ho2=ic3h7o+oh                          1.90E+12    0.0    -1200.0
9285. nc3h7o=c2h5hco+h                             2.51E+14    0.0    23400.0
9286. nc3h7o=c2h5+ch2o                             1.00E+15    0.0    21600.0
9287. ic3h7o=aceton+h                              2.00E+14    0.0    21500.0
9288. ic3h7o=ch3+ch3hco                            3.98E+14    0.0    17200.0
9289. ic3h7o+o2=aceton+ho2                         9.09E+09    0.0      390.0
9290. nc3h7o2h=nc3h7o+oh                           8.06E+19   -1.5    47000.0
9291. ic3h7o2h=ic3h7o+oh                           8.42E+19   -1.4    46080.0
9292. ic3h7o2+acrol=c2h3co+ic3h7o2h                2.80E+12    0.0    13600.0
9293. ic3h7o2+c2h4=c2h3+ic3h7o2h                   1.13E+13    0.0    30430.0
9294. ic3h7o2+c2h5hco=ic3h7o2h+c2h5co              2.00E+11    0.0     9500.0
9295. ic3h7o2+c2h6=ic3h7o2h+c2h5                   1.70E+13    0.0    20460.0
9296. ic3h7o2+ch2o=ic3h7o2h+hco                    5.60E+12    0.0    13600.0
9297. ic3h7o2+ch3hco=ic3h7o2h+ch3co                2.80E+12    0.0    13600.0
9298. ic3h7o2+ch4=ch3+ic3h7o2h                     1.12E+13    0.0    24640.0
9299. ic3h7o2+h2=h+ic3h7o2h                        3.01E+13    0.0    26030.0
9300. ic3h7o2+ch3oh=ch2oh+ic3h7o2h                 6.30E+12    0.0    19360.0
9301. ic3h7o2+ho2=ic3h7o2h+o2                      2.90E+11    0.0     1550.0
9302. ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+c2h5o+o2               5.00E+10    0.0        0.0
9303. ic3h7o2+ic3h7o2=o2+ic3h7o+ic3h7o             5.00E+10    0.0        0.0
9304. ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2             5.00E+10    0.0        0.0
9305. ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2                 1.00E+11    0.0        0.0
9306. ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2                     1.00E+11    0.0        0.0
9307. ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+c2h5o                    1.90E+12    0.0    -1200.0
9308. ic3h7o2+ac3h5=ic3h7o+c3h5o                   1.90E+12    0.0    -1200.0
9309. ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o                      1.90E+12    0.0    -1200.0
9310. nc3h7o2+acrol=c2h3co+nc3h7o2h                2.80E+12    0.0    13600.0
9311. nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h                   1.13E+13    0.0    30430.0
9312. nc3h7o2+c2h5hco=nc3h7o2h+c2h5co              2.00E+11    0.0     9500.0
9313. nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5                   1.70E+13    0.0    20460.0
9314. nc3h7o2+ch2o=nc3h7o2h+hco                    5.60E+12    0.0    13600.0
9315. nc3h7o2+ch3hco=nc3h7o2h+ch3co                2.80E+12    0.0    13600.0
9316. nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h                     1.12E+13    0.0    24640.0
9317. nc3h7o2+h2=h+nc3h7o2h                        3.01E+13    0.0    26030.0
9318. nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h                 6.30E+12    0.0    19360.0
9319. nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2                      2.90E+11    0.0     1550.0
9320. nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+c2h5o+o2               5.00E+10    0.0        0.0
9321. nc3h7o2+nc3h7o2=o2+nc3h7o+nc3h7o             5.00E+10    0.0        0.0
9322. nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2                 1.00E+11    0.0        0.0
9323. nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2                     1.00E+11    0.0        0.0
9324. nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+c2h5o                    1.90E+12    0.0    -1200.0
9325. nc3h7o2+ac3h5=nc3h7o+c3h5o                   1.90E+12    0.0    -1200.0
9326. nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o                      1.90E+12    0.0    -1200.0
9327. nc3h7o2=c3h6ooh1-3                           3.75E+10    0.0    24400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             5.31E+12   -0.6    11180.0
9328. nc3h7o2=c3h6ooh1-2                           2.00E+11    0.0    26850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.90E+12   -0.2    17650.0
9329. ic3h7o2=c3h6ooh2-1                           6.00E+11    0.0    29400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.70E+12   -0.5    14360.0
9330. c3h6ooh1-2=c3h6o+oh                          1.25E+15   -1.2    17580.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.96E+08    1.0    29090.0
9331. c3h6ooh1-3=c3h6o1-3+oh                       4.31E+15   -1.3    18240.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.19E+18   -1.5    33770.0
9332. c3h6ooh2-1=c3h6o+oh                          3.46E+16   -1.6    18870.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.79E+17   -1.5    33090.0
9333. c3h6ooh1-2=c3h6+ho2                          5.50E+14   -0.8    15260.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             6.47E+10    0.2     8279.0
9334. c3h6ooh2-1=c3h6+ho2                          2.44E+19   -2.1    18230.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             5.82E+22   -3.2    13960.0
9335. c3h6ooh1-3=oh+ch2o+c2h4                      1.16E+17   -1.1    32570.0
9336. c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2                   7.54E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.70E+20   -1.5    37610.0
9337. c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2                   4.52E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.21E+19   -1.3    35910.0
9338. c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2                   4.52E+12    0.0        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             8.00E+18   -1.3    35930.0
9339. c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh                      2.00E+11    0.0    26400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.42E+07    0.6    48360.0
9340. c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh                      2.50E+10    0.0    21400.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             4.45E+05    1.0    51030.0
9341. c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh                      1.00E+11    0.0    23850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.14E+05    1.1    49190.0
9342. c3ket12=>ch3hco+hco+oh                       1.05E+16    0.0    41600.0
9343. c3ket13=>ch2o+ch2hco+oh                      1.50E+16    0.0    42000.0
9344. c3ket21=>ch2o+ch3co+oh                       1.50E+16    0.0    42000.0
9345. c3h6o+h=>h2+ch2co+ch3                        2.70E+07    2.0     5000.0
9346. c3h6o+oh=>h2o+ch2co+ch3                      7.80E+06    2.0     -765.0
9347. c3h6o+ho2=>h2o2+ch2co+ch3                    1.20E+12    0.0    15500.0
9348. c3h6o+ch3=>ch4+ch2co+ch3                     6.00E+11    0.0     9600.0
```

```
9349. c3h6o+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3                6.00E+11    0.0     9600.0
9350. c3h6o+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3                   6.00E+11    0.0    11000.0
9351. c3h6o+o=>oh+hco+c2h4                         7.80E+13    0.0     5200.0
9352. c3h6o1-3+h=>h2+hco+c2h4                      2.70E+07    2.0     5000.0
9353. c3h6o1-3+oh=>h2o+hco+c2h4                    7.80E+06    2.0     -765.0
9354. c3h6o1-3+ho2=>h2o2+hco+c2h4                  1.20E+12    0.0    15500.0
9355. c3h6o1-3+ch3=>ch4+hco+c2h4                   6.00E+11    0.0     9600.0
9356. c3h6o1-3+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2h4              4.50E+12    0.0    17500.0
9357. c3h6o1-3+c2h5=>c2h6+hco+c2h4                 6.00E+11    0.0    11000.0
9358. c3h6o1-3+o=>oh+hco+c2h4                      7.80E+13    0.0     5200.0
9359. c3h6o=c2h5+hco                               2.45E+13    0.0    58500.0
9360. c3h6o=c2h5hco                                1.82E+14    0.0    58500.0
9361. c3h6o=ch3+ch3co                              4.54E+13    0.0    59900.0
9362. c3h6o=ch3+ch2hco                             2.45E+13    0.0    58820.0
9363. c3h6o=ch3+c2h3o                              8.00E+15    0.0    92010.0
9364. c3h6o1-3+h=ch2ch2hco+h2                      2.70E+07    2.0     5000.0
9365. c3h6o1-3+oh=ch2ch2hco+h2o                    7.80E+06    2.0     -765.0
9366. c3h6o1-3+ho2=ch2ch2hco+h2o2                  1.20E+12    0.0    15500.0
9367. c3h6o1-3+ch3=ch2ch2hco+ch4                   6.00E+11    0.0     9600.0
9368. c3h6o1-3=c2h5hco                             1.82E+14    0.0    58500.0
9369. ac3h5+h(+m)=c3h6(+m)                         3.70E+14    0.0        0.0
    Low pressure limit:  0.13300E+61 -0.12000E+02  0.59678E+04
    TROE centering:      0.20000E-01  0.10966E+04  0.10966E+04  0.68595E+04
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9370. c3h6=sc3h5+h                                 7.59E+14    0.0   101300.0
9371. c3h6=tc3h5+h                                 1.45E+15    0.0    98060.0
9372. c3h6=c2h3+ch3                                1.10E+21   -1.2    97720.0
9373. c3h6=ch4+c2h2                                3.50E+12    0.0    70000.0
9374. c3h6+o2=ac3h5+ho2                            1.95E+12    0.0    39000.0
9375. c3h6+o2=sc3h5+ho2                            1.40E+13    0.0    60200.0
9376. c3h6+o2=tc3h5+ho2                            7.00E+12    0.0    60200.0
9377. c3h6+ho2=c3h6o+oh                            1.02E+12    0.0    14964.0
9378. c3h6+ho2=ac3h5+h2o2                          1.50E+11    0.0    14190.0
9379. c3h6+ho2=sc3h5+h2o2                          7.50E+09    0.0    12570.0
9380. c3h6+ho2=tc3h5+h2o2                          3.00E+09    0.0     9930.0
9381. c3h6+oh=ac3h5+h2o                            7.70E+05    2.2      622.0
9382. c3h6+oh=sc3h5+h2o                            1.01E+13    0.0     5960.0
9383. c3h6+oh=tc3h5+h2o                            1.11E+06    2.0     1450.0
9384. c3h6+o=c2h5+hco                              4.69E+07    1.6     -628.0
9385. c3h6+o=ch3+ch2hco                            3.90E+07    1.6     -628.0
9386. c3h6+o=c2h4+ch2o                             7.02E+07    1.6     -628.0
9387. c3h6+o=ac3h5+oh                              1.75E+11    0.7     5884.0
9388. c3h6+o=sc3h5+oh                              1.20E+11    0.7     8960.0
9389. c3h6+o=tc3h5+oh                              6.00E+10    0.7     7633.0
9390. c3h6+h=c2h4+ch3                              7.23E+12    0.0     1302.0
9391. c3h6+h=ac3h5+h2                              6.46E+12    0.0     4445.0
9392. c3h6+h=sc3h5+h2                              3.46E+14    0.0    17422.0
9393. c3h6+h=tc3h5+h2                              1.67E+14    0.0    14818.0
9394. c3h6+ch3=ac3h5+ch4                           1.60E+11    0.0     8800.0
9395. c3h6+ch3=sc3h5+ch4                           3.30E+11    0.0    10110.0
9396. c3h6+ch3=tc3h5+ch4                           5.00E+10    0.0     8030.0
9397. c3h6+c2h5=ac3h5+c2h6                         1.00E+11    0.0     9800.0
9398. c3h6+c2h3=c4h6+ch3                           7.20E+11    0.0     5008.0
9399. c3h6+c2h3=ac3h5+c2h4                         2.21E+00    3.5     4682.0
9400. c3h6+c2h3=tc3h5+c2h4                         2.21E+00    3.5     4682.0
9401. c3h6+c2h3=sc3h5+c2h4                         2.21E+00    3.5     4682.0
9402. c3h6+hco=ac3h5+ch2o                          1.08E+07    1.9    17010.0
9403. c3h6+o=ch2co+ch3+h                           2.50E+07    1.8       76.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.00E+00    0.0        0.0
9404. c3h6+o=ch3chco+h+h                           2.50E+07    1.8       76.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             0.00E+00    0.0        0.0
9405. c3h6+ch3o2=ac3h5+ch3o2h                      3.24E+11    0.0    14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             2.00E+10    0.0    15000.0
9406. c3h6+oh=c3h6oh                               9.93E+11    0.0     -960.0
9407. c3h6oh+o2=o2c3h6oh                           1.20E+11    0.0    -1100.0
9408. o2c3h6oh=>ch3hco+ch2o+oh                     1.25E+10    0.0    18900.0
9409. ac3h5+ho2=c3h5o+oh                           7.00E+12    0.0    -1000.0
9410. ac3h5+ch3o2=c3h5o+ch3o                       7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:             1.99E+15   -0.7    17020.0
9411. ac3h5+h=ac3h4+h2                             6.03E+12    0.0        0.0
9412. ac3h5+ch3=ac3h4+ch4                          1.00E+11    0.0        0.0
9413. ac3h5+ch2=c4h6+h                             3.00E+13    0.0        0.0
9414. ac3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                        4.00E+11    0.0        0.0
9415. ac3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                        1.00E+12    0.0        0.0
9416. ac3h5+o=acrol+h                              6.03E+13    0.0        0.0
9417. ac3h5+hco=c3h6+co                            6.03E+13    0.0        0.0
9418. ac3h5+o2=c2h2+ch2o+oh                        9.71E+20   -2.7    24980.0
9419. ac3h5+o2=acrol+oh                            2.47E+13   -0.5    23017.0
9420. ac3h5+o2=ac3h4+ho2                           2.18E+21   -2.9    30755.0
9421. ac3h5+o2=ch2hco+ch2o                         7.14E+15   -1.2    21046.0
9422. sc3h5=pc3h4+h                                5.62E+12    0.0    43500.0
9423. sc3h5+o2=ch3hco+hco                          4.34E+12    0.0        0.0
9424. sc3h5+ho2=>ch2co+ch3+oh                      4.50E+12    0.0        0.0
9425. sc3h5+h=ac3h4+h2                             3.33E+12    0.0        0.0
9426. sc3h5+h=pc3h4+h2                             4.00E+13    0.0        0.0
9427. sc3h5+o=>ch2co+ch3                           1.81E+14    0.0        0.0
9428. sc3h5+ch3=ac3h4+ch4                          1.00E+11    0.0        0.0
9429. sc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                        1.00E+11    0.0        0.0
9430. sc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                        1.00E+11    0.0        0.0
9431. tc3h5=ac3h5                                  2.50E+12    0.0    47000.0
9432. tc3h5+o2=ch3co+ch2o                          5.01E+12    0.0    19000.0
9433. tc3h5+o=>ch2co+ch3                           1.81E+14    0.0        0.0
9434. tc3h5+h=pc3h4+h2                             1.00E+13    0.0        0.0
9435. tc3h5+ch3=ac3h4+ch4                          1.00E+11    0.0        0.0
9436. tc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                        1.00E+11    0.0        0.0
9437. tc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                        1.00E+11    0.0        0.0
9438. c3h4o2h=>ac3h4+ho2                           3.16E+11    0.0    19500.0
9439. ac3h4+m=c3h3+h+m                             2.00E+18    0.0    80000.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
9440. ac3h4=pc3h4                                  3.10E+65  -15.1    93814.0
    Declared duplicate reaction...
9441. ac3h4=pc3h4                                  1.20E+15    0.0    92400.0
    Declared duplicate reaction...
9442. ac3h4+o2=c3h3+ho2                            4.00E+13    0.0    61500.0
9443. ac3h4+ho2=>c3h4o2h                           3.00E+11    0.0     8000.0
9444. ac3h4+ho2=c3h3+h2o2                          1.80E+13    0.0    19000.0
9445. ac3h4+ho2=>ch2co+ch2+oh                      5.00E+11    0.0    19000.0
9446. ac3h4+ho2=>acrol+oh                          5.00E+11    0.0    19000.0
9447. ac3h4+ho2=>c2h2+ch2o+oh                      5.00E+11    0.0    19000.0
9448. ac3h4+oh=c3h3+h2o                            3.62E+12    0.0     4170.0
9449. ac3h4+oh=ch2co+ch3                           1.00E+12    0.0     -393.0
9450. ac3h4+oh=hco+c2h4                            1.25E+11    0.0     -393.0
9451. ac3h4+oh=c2h5+co                             1.88E+11    0.0     -393.0
9452. ac3h4+oh=acrol+h                             3.75E+11    0.0     -393.0
9453. ac3h4+o=c2h4+co                              1.12E-02    4.6    -4243.0
9454. ac3h4+o=c2h3+hco                             5.00E-04    4.6    -4243.0
9455. ac3h4+o=ch2co+ch2                            1.00E-03    4.6    -4243.0
9456. ac3h4+o=c2h2+ch2o                            2.50E-03    4.6    -4243.0
```

```
9457. ac3h4+h=ac3h5                          1.20E+12    0.0     2700.0
9458. ac3h4+h=sc3h5                          8.00E+11    0.0     2000.0
9459. ac3h4+h=tc3h5                          8.50E+12    0.0     2000.0
9460. ac3h4+h=c3h3+h2                        1.00E+14    0.0    15009.0
9461. ac3h4+ch3=c3h3+ch4                     1.33E+12    0.0     7700.0
9462. ac3h4+ac3h5=c3h3+c3h6                  9.00E+11    0.0     7700.0
9463. pc3h4+m=c3h3+h+m                       3.39E+22   -2.0    92370.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
9464. pc3h4=c2h+ch3                          4.20E+16    0.0   100000.0
9465. pc3h4+o2=c3h3+ho2                      2.50E+12    0.0    51000.0
9466. pc3h4+o2=>hcco+oh+ch2                  1.00E+07    1.5    30100.0
9467. pc3h4+ho2=>c2h4+co+oh                  6.09E+09    0.0     7948.0
9468. pc3h4+ho2=ch3co+ch2o                   3.00E+12    0.0    16000.0
9469. pc3h4+ho2=ch3hco+hco                   4.50E+12    0.0    16000.0
9470. pc3h4+ho2=c3h3+h2o2                    5.00E+11    0.0    19000.0
9471. pc3h4+oh=c3h3+h2o                      6.50E+02    3.0      200.0
9472. pc3h4+oh=ch2co+ch3                     2.00E-04    4.5    -1000.0
9473. pc3h4+oh=hco+c2h4                      1.00E-04    4.5    -1000.0
9474. pc3h4+oh=ch2o+c2h3                     1.00E-04    4.5    -1000.0
9475. pc3h4+oh=acrol+h                       1.00E-04    4.5    -1000.0
9476. pc3h4+o=ch2co+ch2                      6.40E+12    0.0     2100.0
9477. pc3h4+o=c2h3+hco                       3.20E+12    0.0     2100.0
9478. pc3h4+o=hcco+ch3                       9.18E+12    0.0     2100.0
9479. pc3h4+o=ch2o+c2h2                      3.20E+11    0.0     2100.0
9480. pc3h4+o=>hcco+ch2+h                    3.20E+11    0.0     2010.0
9481. pc3h4+h=tc3h5                          1.30E+13    0.0     1999.0
9482. pc3h4+h=c3h3+h2                        2.00E+14    0.0    15000.0
9483. pc3h4+ch3=c3h3+ch4                     4.00E+11    0.0     7700.0
9484. pc3h4+c2h3=c3h3+c2h4                   1.00E+11    0.0     7700.0
9485. pc3h4+c2h=c3h3+c2h2                    4.20E+16    0.0   100000.0
9486. c3h4o2h=>c3h4o+oh                      3.16E+11    0.0    19500.0
9487. c3h4o=>acrol                           2.45E+14    0.0    58485.0
9488. c3h4o+o2=>c3h3o+ho2                    4.00E+13    0.0    61500.0
9489. c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh               1.00E+12    0.0    14340.0
9490. c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2                  4.00E+12    0.0    17000.0
9491. c3h4o+oh=>c3h3o+h2o                    4.79E+13    0.0     5955.0
9492. c3h4o+h=>c3h3o+h2                      2.00E+13    0.0     8300.0
9493. c3h3o=>c2h3co                          8.51E+14    0.0    14000.0
9494. c3h3o+o2=>hcco+hco+oh                  5.01E+12    0.0    19192.0
9495. pc3h4+oh(+m)=>c3h4oh(+m)               2.29E+13    0.0     1808.0
    Low pressure limit:  0.74440E+27 -0.31000E+01  0.18080E+04
    TROE centering:      0.17000E+00  0.18000E+03  0.50000E+05  0.12772E+05
9496. c3h4oh=>ch2co+ch3                      3.00E+15    0.0    28000.0
9497. c3h4oh=>hco+c2h4                       5.00E+14    0.0    28000.0
9498. c3h4oh=>ch2o+c2h3                      1.00E+15    0.0    28000.0
9499. c3h4oh=>acrol+h                        5.00E+14    0.0    28000.0
9500. c3h3+o2=ch2co+hco                      3.01E+10    0.0     2870.0
9501. c3h3+ho2=c3h2+h2o2                     2.00E+12    0.0        0.0
9502. c3h3+oh=c3h2+h2o                       5.00E+12    0.0        0.0
9503. c3h3+oh=hcco+ch3                       5.00E+12    0.0        0.0
9504. c3h3+o=>c2h2+hco                       1.38E+14    0.0        0.0
9505. c3h3+o=c2h3+co                         4.62E+13    0.0        0.0
9506. c3h3+o=c2h+ch2o                        4.62E+13    0.0        0.0
9507. c3h3+o=>c2h2+co+h                      4.62E+13    0.0        0.0
9508. c3h3+h=c3h2+h2                         5.00E+13    0.0     3000.0
9509. c3h3+ch=ic4h3+h                        7.00E+13    0.0        0.0
9510. c3h3+ch=nc4h3+h                        7.00E+13    0.0        0.0
9511. c3h3+ch2=c4h4+h                        4.00E+13    0.0        0.0
9512. c3h3+ch3=c4h6                          3.33E+12    0.0        0.0
9513. c3h3+c2h3=c5h5+h                       9.63E+40   -7.8    28820.0
9514. ch+c2h2=c3h2+h                         1.00E+14    0.0        0.0
9515. c3h2+o2=hcco+hco                       3.00E+10    0.0     2870.0
9516. c3h2+oh=c2h2+hco                       5.00E+13    0.0        0.0
9517. c3h2+ch2=ic4h3+h                       3.00E+13    0.0        0.0
9518. c3h5o=acrol+h                          1.00E+14    0.0    29100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       7.71E+11    0.5    17750.0
9519. c3h5o=c2h3+ch2o                        2.03E+12    0.1    23560.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       1.50E+11    0.0    10600.0
9520. c3h5o+o2=acrol+ho2                     1.00E+12    0.0     6000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       1.29E+11    0.0    32000.0
9521. c2h5hco+h=h2+c2h5co                    4.00E+13    0.0     4200.0
9522. c2h5hco+oh=h2o+c2h5co                  4.20E+12    0.0      500.0
9523. c2h5hco+ho2=h2o2+c2h5co                1.00E+12    0.0    10000.0
9524. c2h5hco+ch3=ch4+c2h5co                 2.00E-06    5.6     2500.0
9525. c2h5hco+c2h5=c2h6+c2h5co               1.30E+12    0.0     8500.0
9526. c2h5hco+o2=c2h5co+ho2                  1.00E+13    0.0    40700.0
9527. c2h5co+M=co+c2h5+M                     8.64E+15    0.0    14400.0
9528. acrol+h=h2+c2h3co                      4.00E+13    0.0     4200.0
9529. acrol+oh=h2o+c2h3co                    4.20E+12    0.0      500.0
9530. acrol+ho2=h2o2+c2h3co                  1.00E+12    0.0    10000.0
9531. acrol+ch3=ch4+c2h3co                   2.00E-06    5.6     2500.0
9532. acrol+c2h5=c2h6+c2h3co                 1.30E+12    0.0     8500.0
9533. acrol=c2h3+hco                         2.45E+16    0.0    84128.0
9534. acrol+o=c2h3co+oh                      5.01E+12    0.0     1790.0
9535. acrol+c2h3=c2h4+c2h3co                 1.74E+12    0.0     8440.0
9536. acrol+ac3h5=c3h6+c2h3co                1.00E+12    0.0     8000.0
9537. c2h3co+m=>c2h3+co+m                    8.60E+15    0.0    23000.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9538. aceton+h=h2+ch2coch3                   2.70E+07    2.0     5000.0
9539. aceton+oh=h2o+ch2coch3                 7.80E+06    2.0     -765.0
9540. aceton+ho2=h2o2+ch2coch3               1.20E+12    0.0    15500.0
9541. aceton+ch3=ch4+ch2coch3                6.00E+11    0.0     9600.0
9542. aceton+ch3o2=ch3o2h+ch2coch3           6.00E+11    0.0     9600.0
9543. aceton+c2h5=c2h6+ch2coch3              6.00E+11    0.0    11000.0
9544. ch2coch3=ch2co+ch3                     1.00E+15    0.0    31000.0
9545. ch3coch2o2=ch2coch3+o2                 9.30E+13   -1.1    27450.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       1.20E+11    0.0    -1100.0
9546. aceton+ch3coch2o2=ch2coch3+ch3coch2o2h 1.00E+11    0.0     5000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       2.00E+10    0.0    10000.0
9547. ch2o+ch3coch2o2=hco+ch3coch2o2h        1.29E+11    0.0     9000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       2.51E+10    0.0    10100.0
9548. ho2+ch3coch2o2=ch3coch2o2h+o2          1.00E+12    0.0        0.0
9549. ch3coch2o2h=ch3coch2o+oh               1.00E+16    0.0    43000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       2.04E+09    1.6    -4375.0
9550. ch3coch2o=ch3co+ch2o                   8.71E+16   -1.2    13760.0
       Reverse Arrhenius coefficients:       1.00E+11    0.0    11900.0
9551. c2h4+hco=ch2ch2hco                     2.11E+11    0.0     7350.0
9552. ch2ch2hco+o2=o2c2h4hco                 9.00E+18   -2.5        0.0
9553. o2c2h4hco+ho2=>ho2c2h4hco+o2           2.29E+11    0.0    -1790.0
9554. o2c2h4hco=ho2c2h4co                    5.34E+05    1.9    20273.5
9555. ho2c2h4co=co+c2h4o2h                   2.00E+13    0.0    28700.0
9556. ho2c2h4hco=>oc2h4hco+oh                1.50E+16    0.0    42500.0
9557. ch2o+ch2hco=oc2h4hco                   1.50E+11    0.0    11900.0
9558. ch3cocho+oh=ch3coco+h2o                2.30E+10    0.7    -1100.0
9559. ch3cocho+h=ch3coco+h2                  4.10E+09    1.2     2405.0
9560. ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2              3.00E+12    0.0    12000.0
9561. ch3coco=ch3co+co                       1.40E+14    0.0     6692.0
9562. ch3coco+o2=co2+co2+ch3                 3.00E+10    0.0     2870.0
```

```
9563. ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co                    2.00E+13    0.0        0.0
9564. hcoch2hco+oh=hcoch2co+h2o                   4.60E+10    0.7    -1100.0
9565. hcoch2hco+h=hcoch2co+h2                     8.20E+09    1.2     2405.0
9566. hcoch2hco+ho2=hcoch2co+h2o2                 6.00E+12    0.0    12000.0
9567. hcoch2hco+ch3=hcoch2co+ch4                  1.52E+01    3.4     3740.0
9568. hcoch2hco+o2=hcoch2co+ho2                   6.00E+13    0.0    39200.0
9569. hcoch2co=ch2hco+co                          1.83E+15   -0.7    12910.0
9570. c2h6+ho2=c2h5+h2o2                          8.00E+11    0.0    17600.0
9571. c2h6+oh=c2h5+h2o                            5.11E+06    2.1      854.0
9572. c2h6+o=c2h5+oh                              9.99E+08    1.5     5803.0
9573. c2h6+h=c2h5+h2                              5.25E+14    0.0    12800.0
9574. c2h6+o2=c2h5+ho2                            1.00E+13    0.0    51000.0
9575. c2h6+ch3o=c2h5+ch3oh                        3.02E+11    0.0     7000.0
9576. c2h6+ch3=c2h5+ch4                           7.54E+00    3.7     9883.0
9577. c2h5o2=c2h5+o2                              4.93E+50  -11.5    42250.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.09E+48  -11.5    10220.0
9578. c2h5+ho2=c2h5o+oh                           1.90E+12    0.0    -1200.0
9579. ch3o2+c2h5=ch3o+c2h5o                       7.00E+12    0.0    -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.57E+16   -0.9    31260.0
9580. c2h5o2=c2h4o2h                              5.64E+47  -11.4    37320.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            6.99E+48  -12.2    25850.0
9581. c2h5+ho2=c2h4+h2o2                          1.79E+12    0.0        0.0
9582. c2h5+oh=c2h4+h2o                            2.41E+13    0.0        0.0
9583. c2h5+oh=>ch3+ch2o+h                         2.41E+13    0.0        0.0
9584. c2h5+o=ch2o+ch3                             4.24E+13    0.0        0.0
9585. c2h5+o=ch3hco+h                             5.30E+13    0.0        0.0
9586. c2h5+o=c2h4+oh                              3.05E+13    0.0        0.0
9587. c2h5+h=c2h4+h2                              1.25E+14    0.0     8000.0
9588. c2h5+ch3=c2h4+ch4                           1.14E+12    0.0        0.0
9589. c2h5+c2h5=c2h4+c2h6                         1.40E+12    0.0        0.0
9590. c2h4+h(+M)=c2h5(+M)                         3.97E+09    1.3     1292.0
    Low pressure limit:  0.27910E+19  0.00000E+00  0.75500E+03
    TROE centering:      0.76000E+00  0.40000E+02  0.10250E+04
9591. c2h4+h2=ch3+ch3                             3.77E+12    0.8    84710.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.00E+14    0.0    32000.0
9592. c2h4+ho2=c2h4o+oh                           2.23E+12    0.0    17190.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            3.52E+17   -1.2    39670.0
9593. c2h4+M=c2h2+h2+M                            3.00E+17    0.0    79350.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9594. c2h4+M=c2h3+h+M                             2.97E+17    0.0    96560.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9595. c2h4+ho2=c2h4o2h                            2.00E+11    0.0     8000.0
9596. c2h4+oh=c2h3+h2o                            2.02E+13    0.0     5936.0
9597. c2h4+o=ch3+hco                              1.20E+08    1.4      530.0
9598. c2h4+o=ch2hco+h                             2.00E+08    1.4      530.0
9599. c2h4+h=c2h3+h2                              1.00E+14    0.0    15009.0
9600. c2h4+o2=c2h3+ho2                            4.22E+13    0.0    57629.0
9601. c2h4+c2h4=c2h5+c2h3                         5.00E+14    0.0    64700.0
9602. c2h4+ch3=c2h3+ch4                           6.63E+00    3.7     9499.0
9603. c2h4+ho2=c2h3+h2o2                          4.80E+04    2.5    27622.0
9604. c2h4+oh=pc2h4oh                             1.29E+12    0.0     -817.0
9605. c2h4ohqjA=>ch2o+ch2o+oh                     6.00E+10    0.0    24500.0
9606. c2h3+ho2=>ch3+co+oh                         3.00E+13    0.0        0.0
9607. c2h3+oh=c2h2+h2o                            3.00E+13    0.0        0.0
9608. c2h3+h=c2h2+h2                              3.00E+13    0.0        0.0
9609. c2h3+o=ch3+co                               1.50E+13    0.0        0.0
9610. c2h3+o=ch2co+h                              1.50E+13    0.0        0.0
9611. c2h3+ch=ch2+c2h2                            5.00E+13    0.0        0.0
9612. c2h3+ch2=ac3h4+h                            3.00E+13    0.0        0.0
9613. c2h3+ch3=c2h2+ch4                           3.91E+11    0.0        0.0
9614. c2h3+c2h6=c2h4+c2h5                         1.50E+13    0.0    10000.0
9615. c2h3+c2h=c2h2+c2h2                          9.64E+11    0.0        0.0
9616. c2h3+c2h2=c4h4+h                            2.00E+12    0.0     5000.0
9617. c2h3+hco=c2h4+co                            9.03E+13    0.0        0.0
9618. c2h3+ch2o=c2h4+hco                          5.42E+03    2.8     5862.0
9619. c2h3+c2h3=c2h2+c2h4                         1.08E+13    0.0        0.0
9620. c2h3+c2h3=c4h6                              5.00E+13    0.0        0.0
9621. c2h3+c2h4=c4h6+h                            1.27E+12    0.0     7305.0
9622. c2h3+ch3=ac3h5+h                            4.73E+02    3.7     5677.0
9623. c2h2+oh(+m)=c2h2oh(+m)                      2.29E+13    0.0     1808.0
    Low pressure limit:  0.74400E+27 -0.31000E+01  0.18080E+04
    TROE centering:      0.17000E+00  0.18000E+03  0.50000E+05  0.12772E+05
9624. c2h2+o2=hcco+oh                             2.00E+08    1.5    30100.0
9625. c2h2+o2=c2h+ho2                             1.21E+13    0.0    74520.0
9626. c2h2+ho2=ch2co+oh                           6.09E+09    0.0     7948.0
9627. c2h2+oh=c2h+h2o                             3.40E+07    2.0    14000.0
9628. c2h2+oh=ch3+co                              4.84E-04    4.0    -2000.0
9629. c2h2+oh=ch2co+h                             2.19E-04    4.5    -1000.0
9630. c2h2+oh=hccoh+h                             5.06E+05    2.3    13500.0
9631. c2h2+o=ch2+co                               1.98E+04    2.6      656.0
9632. c2h2+o=hcco+h                               4.62E+04    2.6      656.0
9633. c2h2+ch3=c2h+ch4                            1.80E+11    0.0    17290.0
9634. c2h2+h(+m)=c2h3(+m)                         2.34E+15   -0.9     3064.0
    Low pressure limit:  0.22540E+41 -0.72700E+01  0.65770E+04
    TROE centering:      0.50000E+00  0.67500E+03  0.67500E+03
       h2o              Enhanced by    5.000E+00
       co               Enhanced by    2.000E+00
       co2              Enhanced by    3.000E+00
       h2               Enhanced by    2.000E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9635. c2h+h2=c2h2+h                               1.51E+13    0.0     3100.0
9636. c2h+oh=hcco+h                               2.00E+13    0.0        0.0
9637. c2h+o=co+ch                                 1.00E+13    0.0        0.0
9638. c2h+o2=co+hco                               2.41E+12    0.0        0.0
9639. c2h4o=ch4+co                                1.21E+13    0.0    57200.0
9640. c2h4o=ch3hco                                6.00E+13    0.0    57200.0
9641. c2h4o=ch3+hco                               4.90E+13    0.0    57200.0
9642. c2h4o+o2=c2h3o+ho2                          4.00E+13    0.0    61500.0
9643. c2h4o+h=c2h3o+h2                            2.00E+13    0.0     8300.0
9644. c2h4o+h=c2h3+h2o                            5.00E+09    0.0     5000.0
9645. c2h4o+h=c2h4+oh                             9.51E+10    0.0     5000.0
9646. c2h4o+o=c2h3o+oh                            1.91E+12    0.0     5250.0
9647. c2h4o+oh=c2h3o+h2o                          4.79E+13    0.0     5955.0
9648. c2h4o+ho2=c2h3o+h2o2                        4.00E+12    0.0    17000.0
9649. c2h4o+ch3=ch4+c2h3o                         1.07E+12    0.0    11830.0
9650. c2h4o2h=c2h4o+oh                            3.16E+11    0.0    19500.0
9651. c2h5o2+ch3=c2h5o+ch3o                       8.17E+12    0.0     -906.0
9652. c2h5o2=c2h4+ho2                             3.57E+04    2.3    27955.0
9653. c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2                       3.40E+11    0.0    -1300.0
9654. c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+hco                     1.99E+12    0.0    11660.0
9655. c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h                    2.23E+12    0.0    17190.0
9656. ch4+c2h5o2=ch3+c2h5o2h                      1.81E+11    0.0    18480.0
9657. ch3oh+c2h5o2=ch2oh+c2h5o2h                  1.81E+12    0.0    13710.0
9658. c2h6+c2h5o2=c2h5+c2h5o2h                    1.32E+13    0.0    20470.0
```

```
9659. c2h4o+c2h5o2=c2h3o+c2h5o2h                  1.13E+13    0.0    30430.0
9660. c3h6+c2h5o2=ac3h5+c2h5o2h                   3.24E+11    0.0    14900.0
9661. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7                   1.70E+13    0.0    20460.0
9662. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7                   2.00E+12    0.0    17000.0
9663. c4h8+c2h5o2=Cc4h7-1+c2h5o2h                 1.40E+12    0.0    14900.0
9664. c2h5o2+c2h5o2=c2h5o+c2h5o+o2                1.40E+16   -1.6     1860.0
9665. c2h5o2h=c2h5o+oh                            4.00E+15    0.0    42900.0
9666. c2h5o2h+o=oh+c2h5o2                         2.00E+13    0.0     4750.0
9667. c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o                       2.00E+12    0.0     -370.0
9668. c2h5o2h+h=ch3hco+oh+h2                      3.20E+13    0.0     7700.0
9669. c2h5o2h+ch3=ch3hco+oh+ch4                   5.70E+11    0.0     8700.0
9670. c2h5o2h+c2h5=ch3hco+oh+c2h6                 3.40E+11    0.0    11400.0
9671. c2h5o2h+oh=ch3hco+oh+h2o                    5.90E+12    0.0      900.0
9672. c2h5o2h+hco=ch3hco+oh+ch2o                  1.80E+12    0.0    16700.0
9673. c2h5o2h+ch3o=ch3hco+oh+ch3oh                6.30E+11    0.0     5500.0
9674. c2h5o2h+ho2=ch3hco+oh+h2o2                  8.00E+11    0.0    16200.0
9675. ch2hco+o2=ch2co+ho2                         1.58E+10    0.0        0.0
9676. ch2hco+o2=ch2o+co+oh                        2.51E+10    0.0        0.0
9677. ch2hco+o2=oh+chocho                         2.51E+11    0.0    14640.0
9678. ch2hco+o=ch2o+hco                           3.98E+13    0.0        0.0
9679. ch2hco+ho2=ch2o+hco+oh                      1.00E+13    0.0        0.0
9680. ch2hco+oh=ch2co+h2o                         2.00E+13    0.0        0.0
9681. h+ch2co(+m)=ch2hco(+m)                      4.86E+11    0.4    -1755.0
    Low pressure limit:  0.10120E+43 -0.76300E+01  0.38540E+04
    TROE centering:      0.46500E+00  0.20100E+03  0.17730E+04  0.53330E+04
       h2o              Enhanced by    6.000E+00
       co               Enhanced by    1.500E+00
       co2              Enhanced by    2.000E+00
       ch4              Enhanced by    2.000E+00
       c2h5             Enhanced by    3.000E+00
       h2               Enhanced by    2.000E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9682. ch2hco+h=ch2co+h2                           4.00E+13    0.0        0.0
9683. ch2hco+ch3=>c2h5+co+h                       4.90E+14   -0.5        0.0
9684. ch2co+m=ch2+co+m                            3.60E+15    0.0    59270.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9685. ch2co+o2=ch2o+co2                           2.00E+13    0.0    61500.0
9686. ch2co+ho2=>ch2o+co+oh                       6.00E+11    0.0    12738.0
9687. ch2co+o=ch2+co2                             1.76E+12    0.0     1349.0
9688. ch2co+o=hcco+oh                             1.00E+13    0.0     8000.0
9689. ch2co+oh=ch2oh+co                           6.93E+12    0.0        0.0
9690. ch2co+oh=hco+ch2o                           2.04E+11    0.0        0.0
9691. ch2co+oh=hcco+h2o                           1.02E+11    0.0        0.0
9692. ch2co+oh=ch3+co2                            3.10E+12    0.0        0.0
9693. ch2co+h=ch3+co                              1.50E+04    2.8      673.0
9694. ch2co+h=hcco+h2                             1.80E+14    0.0     8600.0
9695. ch2co+ch3=c2h5+co                           6.00E+10    0.0        0.0
9696. ch2co+ch3=hcco+ch4                          7.50E+12    0.0    13000.0
9697. ch2co+ch2=hcco+ch3                          1.00E+12    0.0        0.0
9698. ch2co+ch2=c2h4+co                           3.60E+13    0.0    11000.0
9699. ch+ch2o=ch2co+h                             9.46E+13    0.0     -515.0
9700. hccoh+h=ch2co+h                             1.00E+13    0.0        0.0
9701. c2h3o=ch2co+h                               1.60E+13    0.0    35000.0
9702. chocho(+m)=ch2o+co(+m)                      4.27E+12    0.0    50600.0
    Low pressure limit:  0.89100E+17  0.00000E+00  0.49200E+05
```

```
9703. chocho(+m)=co+co+h2(+m)                     1.07E+14    0.0    55100.0
    Low pressure limit:  0.25700E+17  0.00000E+00  0.38400E+05
9704. chocho+oh=choco+h2o                         1.00E+13    0.0        0.0
9705. chocho+o=choco+oh                           7.24E+12    0.0     1970.0
9706. chocho+h=ch2o+hco                           1.00E+12    0.0        0.0
9707. chocho+ho2=choco+h2o2                       1.70E+12    0.0    10700.0
9708. chocho+ch3=choco+ch4                        1.74E+12    0.0     8440.0
9709. chocho+o2=hco+co+ho2                        6.30E+13    0.0    30000.0
9710. choco=hco+co                                2.00E+07    0.0        0.0
9711. choco+o2=co+co+ho2                          6.30E+13    0.0    30000.0
9712. c2h2oh=ch2co+h                              5.00E+15    0.0    28000.0
9713. c2h2oh+h=ch2co+h2                           2.00E+13    0.0     4000.0
9714. c2h2oh+o=ch2co+oh                           2.00E+13    0.0     4000.0
9715. c2h2oh+oh=ch2co+h2o                         1.00E+13    0.0     2000.0
9716. c2h2oh+o2=>hco+co2+h2                       4.00E+12    0.0     -250.0
9717. hcco+m=ch+co+m                              6.00E+15    0.0    58821.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9718. hcco+oh=hco+co+h                            1.00E+13    0.0        0.0
9719. hcco+o=co+co+h                              1.93E+14    0.0      590.0
9720. hcco+h=sch2+co                              1.50E+14    0.0        0.0
9721. hcco+o2=co2+co+h                            1.40E+09    1.0        0.0
9722. hcco+ch2=c2h+ch2o                           1.00E+13    0.0     2000.0
9723. hcco+ch2=c2h3+co                            3.00E+13    0.0        0.0
9724. hcco+c2h2=c3h3+co                           1.00E+11    0.0     3000.0
9725. hcco+ch=c2h2+co                             5.00E+13    0.0        0.0
9726. hcco+hcco=c2h2+co+co                        1.00E+13    0.0        0.0
9727. hcco+o=ch+co2                               2.95E+13    0.0     1113.0
9728. ch3hco=ch3+hco                              2.45E+16    0.0    84128.0
9729. ch3hco+ho2=ch3co+h2o2                       1.70E+12    0.0    10700.0
9730. ch3hco+oh=ch3co+h2o                         2.35E+10    0.7    -1113.0
9731. ch3hco+o=ch3co+oh                           5.85E+12    0.0     1808.0
9732. ch3hco+h=ch3co+h2                           4.10E+09    1.2     2405.0
9733. ch3hco+o2=ch3co+ho2                         3.00E+13    0.0    39150.0
9734. ch3hco+ch3=ch3co+ch4                        1.70E+12    0.0     8440.0
9735. ch3hco+hco=ch3co+ch2o                       7.80E+13    0.0     8440.0
9736. ch3o2+ch3hco=ch3o2h+ch3co                   3.01E+12    0.0    11930.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            2.52E+13   -0.5     8991.0
9737. ch3hco+ch3co3=ch3co+ch3co3h                 3.01E+12    0.0    11930.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            1.96E+12    0.0    26810.0
9738. ch3hco+oh=ch3+hocho                         3.00E+15   -1.1        0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:            5.35E+19   -1.7   119800.0
9739. ch3co+m=ch3+co+m                            8.64E+15    0.0    14400.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9740. ch3co+o2=ch3co3                             1.20E+11    0.0    -1100.0
9741. ch3co3+ho2=ch3co3h+o2                       1.75E+10    0.0    -3275.0
9742. ch3co3h=ch3co2+oh                           5.01E+14    0.0    40150.0
9743. ch3co2+m=ch3+co2+m                          4.40E+15    0.0    10500.0
9744. c2h3o=ch3co                                 8.51E+14    0.0    14000.0
9745. c2o+o2=co+co+o                              2.00E+13    0.0        0.0
```

```
9746. c2o+oh=co+co+h                              2.00E+13    0.0        0.0
9747. c2o+o=co+co                                 5.00E+13    0.0        0.0
9748. c2o+h=ch+co                                 5.00E+13    0.0        0.0
9749. c2+o2=co+co                                 5.00E+13    0.0        0.0
9750. c2+oh=c2o+h                                 5.00E+13    0.0        0.0
9751. c2+h2=c2h+h                                 4.00E+05    2.4     1000.0
9752. c2h2+ch3=pc3h4+h                            4.78E+03    2.4    12893.0
9753. c2h2+ch3=ac3h5                              1.40E+04    2.2    16502.0
9754. c2h2+ch3=sc3h5                              3.85E+56  -13.7    27892.0
9755. h+c2h5(+m)=c2h6(+m)                         5.21E+17   -1.0     1580.0
    Low pressure limit:  0.19900E+42 -0.70800E+01  0.66850E+04
    TROE centering:      0.84220E+00  0.12500E+03  0.22190E+04  0.68820E+04
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9756. h+c2h(+m)=c2h2(+m)                          1.00E+17   -1.0        0.0
    Low pressure limit:  0.37500E+34 -0.48000E+01  0.19000E+04
    TROE centering:      0.64640E+00  0.13200E+03  0.13150E+04  0.55660E+04
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
9757. sc4h9(+m)=c3h6+ch3(+m)                      2.27E+48  -10.5    45869.0
    Low pressure limit:  0.99330E+52 -0.10500E+02  0.34989E+05
    TROE centering:      0.37100E+00  0.10000E-14  0.57400E+03  0.25390E+04
9758. c2h3+c2h2(+m)=ic4h5(+m)                     1.00E+04    2.4    17900.0
    Low pressure limit:  0.26000E+39 -0.74100E+01  0.75000E+04
9759. ic4h5(+m)=c4h4+h(+m)                        1.00E+14    0.0    50000.0
    Low pressure limit:  0.20000E+16  0.00000E+00  0.42000E+05
9760. nc4h5(+m)=c4h4+h(+m)                        1.00E+14    0.0    37000.0
    Low pressure limit:  0.10000E+15  0.00000E+00  0.30000E+05
9761. ic4h3(+m)=c4h2+h(+m)                        1.00E+14    0.0    55000.0
    Low pressure limit:  0.25000E+16  0.00000E+00  0.48000E+05
9762. nc4h3(+m)=c4h2+h(+m)                        1.00E+14    0.0    36000.0
    Low pressure limit:  0.10000E+15  0.00000E+00  0.30000E+05
9763. co+ho2=co2+oh                               1.15E+05    2.3    17550.0
9764. co+oh=co2+h                                 4.40E+06    1.5     -740.0
9765. co+o+m=co2+m                                2.83E+13    0.0    -4540.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9766. co+o2=co2+o                                 2.53E+12    0.0    47700.0
9767. hco+m=h+co+m                                2.30E+17   -1.0    17090.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9768. hco+oh=co+h2o                               1.00E+14    0.0        0.0
9769. hco+o=co+oh                                 3.00E+13    0.0        0.0
9770. hco+o=co2+h                                 3.00E+13    0.0        0.0
9771. hco+h=co+h2                                 7.22E+13    0.0        0.0
9772. hco+o2=co+ho2                               7.58E+12    0.0      410.0
9773. hco+ch3=co+ch4                              1.20E+14    0.0        0.0
9774. hco+ho2=co2+oh+h                            3.00E+13    0.0        0.0
9775. hco+hco=ch2o+co                             1.20E+13    0.0        0.0
9776. hco+hco=h2+co+co                            3.00E+12    0.0        0.0
9777. hco+c2h6=ch2o+c2h5                          4.70E+04    2.7    18235.0
9778. ch3+ho2=ch4+o2                              1.00E+12    0.0        0.0
9779. ch4(+m)=ch3+h(+m)                           2.40E+16    0.0   104913.0
    Low pressure limit:  0.45000E+18  0.00000E+00  0.90800E+05
    TROE centering:      0.64000E+00  0.10000E-14  0.31950E+04  0.12126E+05
9780. ch4+oh=ch3+h2o                              1.60E+06    2.1     2462.0
9781. ch4+o=ch3+oh                                1.62E+06    2.3     7094.0
9782. ch4+h=ch3+h2                                2.25E+04    3.0     8756.6
9783. ch4+ch2=ch3+ch3                             4.30E+12    0.0    10038.0
9784. ch3+m=ch2+h+m                               1.90E+16    0.0    91600.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9785. ch3+m=ch+h2+m                               6.90E+14    0.0    82460.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9786. ch3+ho2=ch3o+oh                             5.00E+11    0.3     -687.6
9787. ch3+h2o2=ch4+ho2                            6.10E+09    0.0     -596.0
9788. ch3+o=h+ch2o                                8.43E+13    0.0        0.0
9789. ch3+o=>h+h2+co                              3.37E+13    0.0        0.0
9790. ch3+o2=ch2o+oh                              6.62E+11    0.0    14188.0
9791. ch3+o2=ch3o+o                               6.60E+13    0.0    31398.0
9792. ch3+ch3=c2h5+h                              3.01E+13    0.0    13513.0
9793. ch3+ch3(+m)=c2h6(+m)                        9.21E+16   -1.2      635.8
    Low pressure limit:  0.11350E+37 -0.52500E+01  0.17050E+04
    TROE centering:      0.40500E+00  0.11200E+04  0.69600E+02  0.10000E+16
9794. ch3+ch3o=ch4+ch2o                           2.41E+13    0.0        0.0
9795. ch3+ch2oh=ch4+ch2o                          2.41E+12    0.0        0.0
9796. ch3+o2(+m)=ch3o2(+m)                        7.80E+08    1.2        0.0
    Low pressure limit:  0.58000E+26 -0.33000E+01  0.00000E+00
    TROE centering:      0.66400E+00  0.10000E+06  0.10000E+02
9797. ch3+h=ch2+h2                                7.00E+13    0.0    15100.0
9798. ch3+oh=ch2+h2o                              3.00E+06    2.0     2500.0
9799. ch2+oh=ch+h2o                               1.13E+07    2.0     3000.0
9800. ch2+oh=ch2o+h                               2.50E+13    0.0        0.0
9801. ch2+o=co+h+h                                5.00E+13    0.0        0.0
9802. ch2+o=co+h2                                 6.00E+13    0.0        0.0
9803. ch2+h=ch+h2                                 3.50E+14    0.0        0.0
9804. ch2+o2=hco+oh                               4.30E+10    0.0     -500.0
9805. ch2+o2=co2+h2                               3.45E+11    0.0     1000.0
9806. ch2+o2=co2+h+h                              1.60E+12    0.0     1000.0
9807. ch2+o2=co+h2o                               1.87E+10    0.0    -1000.0
9808. ch2+o2=co+oh+h                              8.64E+10    0.0     -500.0
9809. ch2+o2=ch2o+o                               5.00E+13    0.0     9000.0
9810. ch2+co2=ch2o+co                             1.10E+11    0.0     1000.0
9811. ch2+ch2=c2h2+h2                             3.20E+13    0.0        0.0
9812. ch2+ch2=c2h2+h+h                            4.00E+13    0.0        0.0
```

```
9813. ch2+ch3=c2h4+h                              4.00E+13    0.0        0.0
9814. ch2+ch=c2h2+h                               4.00E+13    0.0        0.0
9815. ch2+c2h2=h+c3h3                             1.20E+13    0.0     6620.0
9816. ch2+c2h4=c3h6                               4.30E+12    0.0    10038.0
9817. ch2+c2h6=ch3+c2h5                           6.50E+12    0.0     7911.0
9818. sch2+m=ch2+m                                1.00E+13    0.0        0.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9819. sch2+o2=co+oh+h                             3.00E+13    0.0        0.0
9820. sch2+h2=ch3+h                               7.00E+13    0.0        0.0
9821. sch2+h=ch2+h                                2.00E+14    0.0        0.0
9822. sch2+h=ch+h2                                3.00E+13    0.0        0.0
9823. sch2+o=co+h+h                               1.50E+13    0.0        0.0
9824. sch2+o=co+h2                                1.50E+13    0.0        0.0
9825. sch2+oh=ch2o+h                              3.00E+13    0.0        0.0
9826. sch2+ho2=ch2o+oh                            3.00E+13    0.0        0.0
9827. sch2+h2o2=ch3o+oh                           3.00E+13    0.0        0.0
9828. sch2+h2o(+m)=ch3oh(+m)                      4.82E+17   -1.2     1145.0
    Low pressure limit:  0.18800E+39 -0.63600E+01  0.50400E+04
    TROE centering:      0.60270E+00  0.20800E+03  0.39220E+04  0.10180E+05
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9829. sch2+ch2o=ch3+hco                           1.20E+12    0.0        0.0
9830. sch2+hco=ch3+co                             1.80E+13    0.0        0.0
9831. sch2+ch3=c2h4+h                             1.80E+13    0.0        0.0
9832. sch2+ch4=ch3+ch3                            4.00E+13    0.0        0.0
9833. sch2+c2h6=ch3+c2h5                          1.20E+14    0.0        0.0
9834. sch2+c2h4=ac3h5+h                           1.30E+14    0.0        0.0
9835. sch2+c2h2=c3h3+h                            1.80E+14    0.0        0.0
9836. sch2+h2o=ch2+h2o                            3.00E+13    0.0        0.0
9837. sch2+co2=ch2o+co                            3.00E+12    0.0        0.0
9838. sch2+ch2co=c2h4+co                          1.60E+14    0.0        0.0
9839. ch+oh=hco+h                                 3.00E+13    0.0        0.0
9840. ch+o=co+h                                   1.80E+14    0.0        0.0
9841. ch+o=C+oh                                   1.80E+14    0.0        0.0
9842. ch+o2=hco+o                                 1.00E+13    0.0        0.0
9843. ch+o2=co+oh                                 1.00E+13    0.0        0.0
9844. ch+co2=hco+co                               3.40E+12    0.0      690.0
9845. ch+h2o=ch2o+h                               1.71E+13    0.0     -755.0
9846. ch+ch4=c2h4+h                               6.00E+13    0.0        0.0
9847. ch+ch3=c2h3+h                               3.00E+13    0.0        0.0
9848. ch3+oh(+m)=ch3oh(+m)                        5.65E+13    0.1        0.0
    Low pressure limit:  0.57500E+42 -0.74000E+01  0.62600E+03
    TROE centering:      0.25000E-01  0.10000E-14  0.80000E+04  0.30000E+04
       h2o              Enhanced by    1.600E+01
       co               Enhanced by    2.000E+00
       co2              Enhanced by    3.000E+00
       h2               Enhanced by    2.000E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9849. ch3oh(+m)=ch2oh+h(+m)                       2.69E+16   -0.1    98940.0
    Low pressure limit:  0.23400E+41 -0.63300E+01  0.10310E+06
    TROE centering:      0.77300E+00  0.69300E+03  0.53330E+04  0.10000E-09
9850. ch3oh+o2=ch2oh+ho2                          2.05E+13    0.0    44910.0
9851. ch3oh+o2=ch3o+ho2                           2.50E+12    0.0    55000.0
9852. ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2                        4.82E+10    0.0    12580.0
9853. ch3oh+oh=ch2oh+h2o                          1.30E+13    0.0     5960.0
9854. ch3oh+oh=ch3o+h2o                           1.30E+13    0.0     5960.0
9855. ch3oh+o=ch2oh+oh                            1.63E+13    0.0     5030.0
9856. ch3oh+h=ch2oh+h2                            3.20E+13    0.0     6095.0
9857. ch3oh+h=h2+ch3o                             8.00E+12    0.0     6095.0
9858. ch3oh+h=ch3+h2o                             1.70E+13    0.0     5311.0
9859. ch3oh+ch2o=ch3o+ch3o                        1.55E+12    0.0    79570.0
9860. ch3oh+ch3=ch2oh+ch4                         3.57E+11    0.0     8663.0
9861. ch3oh+ch3=ch3o+ch4                          4.68E+05    2.3    12764.0
9862. ch2oh+m=ch2o+h+m                            1.00E+14    0.0    25100.0
       h2o              Enhanced by    1.000E+00
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9863. ch2oh+h=ch2o+h2                             3.00E+13    0.0        0.0
9864. ch2oh+o2=ch2o+ho2                           2.17E+14    0.0     4690.0
9865. ch2oh+o=ch2o+oh                             4.20E+13    0.0        0.0
9866. ch2oh+ho2=ch2o+h2o2                         1.20E+13    0.0        0.0
9867. ch2oh+hco=ch3oh+co                          1.00E+13    0.0        0.0
9868. ch3o+m=ch2o+h+m                             4.88E+15    0.0    22773.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9869. ch3o+ho2=ch2o+h2o2                          3.00E+11    0.0        0.0
9870. ch3o+oh=ch2o+h2o                            1.00E+13    0.0        0.0
9871. ch3o+o=ch2o+oh                              1.30E+13    0.0        0.0
9872. ch3o+h=ch2o+h2                              2.00E+13    0.0        0.0
9873. ch3o+o2=ch2o+ho2                            2.35E+10    0.0     1788.0
9874. ch3o+ch2o=ch3oh+hco                         1.15E+11    0.0     1280.0
9875. ch3o+co=ch3+co2                             1.57E+13    0.0    11804.0
9876. ch3o+hco=ch3oh+co                           9.00E+13    0.0        0.0
9877. ch3o+c2h5=ch2o+c2h6                         2.41E+13    0.0        0.0
9878. ch3o+c2h3=ch2o+c2h4                         2.41E+13    0.0        0.0
9879. ch3o+c2h4=ch2o+c2h5                         1.20E+11    0.0     7000.0
9880. ch3o2+ho2=ch3o2h+o2                         2.90E+11    0.0     1552.0
9881. ch3o2h+oh=ch3o2+h2o                         1.15E+12    0.0     -380.0
9882. ch3o2h+o=oh+ch3o2                           2.00E+13    0.0     4750.0
9883. ch3o2h+h=ch3o2+h2                           8.80E+10    0.0     1860.0
9884. ch3o2h+h=ch3o+h2o                           8.20E+10    0.0     1860.0
9885. ch2o+ch3o2=hco+ch3o2h                       2.00E+12    0.0    11700.0
9886. ch3o2+ch4=ch3+ch3o2h                        1.80E+11    0.0    18500.0
9887. ch3o2+ch3oh=ch2oh+ch3o2h                    1.80E+12    0.0    13712.0
9888. ch3o2+ho2=ch2o+h2o+o2                       1.80E+10    0.0    -1431.0
9889. ch3o2+ch3o2=ch2o+ch3oh+o2                   1.05E+09    0.0    -3589.0
9890. ch3o2+ch3o2=ch3o+ch3o+o2                    7.74E+10    0.0      -61.0
9891. ch3o2+c2h6=ch3o2h+c2h5                      2.95E+11    0.0    15000.0
9892. ch3o2+ch3=ch3o+ch3o                         1.00E+12    0.0    -1411.0
9893. ch3o2+oh=ch3oh+o2                           6.00E+13    0.0        0.0
9894. ch3o2+h=ch3o+oh                             9.60E+13    0.0        0.0
9895. ch3o2+h2o2=ch3o2h+ho2                       2.41E+12    0.0     9936.0
```

```
9896. ch3o2+o=ch3o+o2                              3.60E+13    0.0        0.0
9897. ch3o2+ch3o=ch3o2h+ch2o                       3.00E+11    0.0        0.0
9898. ch3o2+ch2oh=ch2o+ch3o2h                      1.20E+13    0.0        0.0
9899. ch3o2+c2h5o2=o2+ch3o+c2h5o                   7.74E+10    0.0      -61.0
9900. ch3o2h=ch3o+oh                               6.30E+14    0.0    42300.0
9901. ch3o2h(+m)=ch3o+oh(+m)                       4.05E+19   -1.1    44255.0
    Low pressure limit:  0.64600E+19 -0.75000E+01  0.46761E+05
    TROE centering:      0.83750E+00  0.36562E+05  0.49880E+03  0.99900E+04
9902. ch2o+oh=hco+h2o                              1.72E+09    1.2     -447.0
9903. ch2o+ch3=hco+ch4                             7.80E-08    6.1     1970.0
9904. ch2o+m=hco+h+m                               5.85E+14    0.0    64200.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9905. ch2o+ho2=hco+h2o2                            2.20E+06    2.0    12000.0
9906. ch2o+o=hco+oh                                1.81E+13    0.0     3088.0
9907. ch2o+h=hco+h2                                1.10E+08    1.8     3000.0
9908. ch2o+o2=hco+ho2                              1.23E+06    3.0    52000.0
9909. h+h+m=h2+m                                   1.00E+18   -1.0        0.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9910. h+o2=oh+o                                    1.90E+14    0.0    16812.0
9911. h+o2+m=ho2+m                                 8.00E+17   -0.8        0.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    4.000E-01
9912. h+oh+m=h2o+m                                 3.00E+22   -2.0        0.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9913. h2+o2=oh+oh                                  1.70E+13    0.0    47780.0
9914. o+h2=oh+h                                    1.30E+04    2.8     5922.0
9915. h2+oh=h2o+h                                  2.16E+08    1.5     3430.0
9916. o+o+m=o2+m                                   1.14E+17   -1.0        0.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9917. o+h+m=oh+m                                   6.20E+16   -0.6        0.0
       h2o              Enhanced by    1.625E+01
       co               Enhanced by    1.875E+00
       co2              Enhanced by    3.750E+00
       ch4              Enhanced by    1.625E+01
       c2h6             Enhanced by    1.625E+01
       h2               Enhanced by    2.500E+00
       ar               Enhanced by    7.500E-01
9918. h2o+o=oh+oh                                  1.50E+10    1.1    17260.0
9919. ho2+oh=h2o+o2                                1.45E+13    0.0     -497.0
9920. ho2+o=oh+o2                                  2.44E+13    0.0     -446.0
9921. h+ho2=h2+o2                                  2.14E+13    0.0     1411.0
9922. h+ho2=oh+oh                                  8.40E+13    0.0      875.0
9923. h+ho2=h2o+o                                  3.01E+13    0.0     1721.0
9924. ho2+ho2=h2o2+o2                              4.20E+14    0.0    11982.0
    Declared duplicate reaction...
9925. ho2+ho2=h2o2+o2                              1.30E+11    0.0    -1630.0
    Declared duplicate reaction...
9926. oh+oh(+m)=h2o2(+m)                           7.22E+13   -0.4        0.0
    Low pressure limit:  0.22110E+20 -0.76000E+00  0.00000E+00
    TROE centering:      0.50000E+00  0.10000E+09  0.10000E-05
9927. h2o2+oh=ho2+h2o                              5.80E+14    0.0     9557.0
9928. h2o2+h=ho2+h2                                1.70E+12    0.0     3750.0
9929. h2o2+h=h2o+oh                                1.00E+13    0.0     3590.0
9930. h2o2+o=ho2+oh                                2.80E+13    0.0     6400.0
9931. c2h3+o2=ch2hco+o                             5.50E+14   -0.6     5260.0
9932. c2h3+o2=ch2o+hco                             4.50E+16   -1.4     1000.0
9933. c2h3+o2(+m)=chocho+h(+m)                     8.90E+23   -1.1    11452.4
    Low pressure limit:  0.19100E+19 -0.22700E+01  0.15770E+04
    TROE centering:      0.28620E-03  0.10000E+01  0.10000E+05  0.41620E+04
9934. c2h3+o2(+m)=c2h2+ho2(+m)                     3.61E+27   -0.5    16383.0
    Low pressure limit:  0.51900E+16 -0.12800E+01  0.33103E+04
    TROE centering:      0.99270E-06  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9935. c2h5+o2(+m)=c2h4+ho2(+m)                     1.00E+30   -2.0    15860.0
    Low pressure limit:  0.25600E+20 -0.27300E+01  0.19780E+04
    TROE centering:      0.63370E-05  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9936. c2h5+o2(+m)=ch3hco+oh(+m)                    6.93E+17   -1.9    14020.2
    Low pressure limit:  0.45500E+14 -0.93000E+00  0.96650E+04
    TROE centering:      0.20950E-01  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9937. c2h5+o2(+m)=c2h4o2h(+m)                      1.00E+30   -4.6    16148.1
    Low pressure limit:  0.10000E+31 -0.50300E+01  0.42055E+04
    TROE centering:      0.13320E+00  0.10000E+01  0.99960E+04  0.50170E+04
9938. ch3+oh(+m)=ch2oh+h(+m)                       1.99E+21   -0.8    11157.0
    Low pressure limit:  0.35000E+15 -0.42000E+00  0.29780E+04
    TROE centering:      0.10240E-02  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9939. ch3+oh(+m)=ch3o+h(+m)                        9.95E+14   -0.8    16872.0
    Low pressure limit:  0.91600E+12 -0.10000E-01  0.13083E+05
    TROE centering:      0.00000E+00  0.10000E+01  0.10090E+05  0.11860E+04
9940. ch3+oh(+m)=sch2+h2o(+m)                      6.37E+20   -0.1    11141.0
    Low pressure limit:  0.13800E+15 -0.50000E+00  0.19650E+04
    TROE centering:      0.12910E-03  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9941. ch3+oh(+m)=ch2o+h2(+m)                       7.39E+17   -0.7    14551.0
    Low pressure limit:  0.21700E+11  0.13000E+00  0.87860E+04
    TROE centering:      0.16120E-02  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9942. nc4h5+c2h2(+m)=c6h6+h(+m)                    1.65E+16   -1.0     9480.0
    Low pressure limit:  0.78290E+16 -0.95000E+00  0.90339E+04
    TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9943. nc4h5+c2h2(+m)=fulvene+h(+m)                 1.23E+22   -1.8    16152.0
    Low pressure limit:  0.46250E+16 -0.93000E+00  0.91513E+04
    TROE centering:      0.00000E+00  0.10000E+01  0.10060E+05  0.15470E+04
9944. ic4h5+c2h2(+m)=c6h6+h(+m)                    1.00E+30   -4.1    27360.4
    Low pressure limit:  0.16680E+24 -0.33900E+01  0.21023E+05
    TROE centering:      0.44030E-06  0.10000E+01  0.99060E+04  0.46730E+04
9945. ic4h5+c2h2(+m)=fulvene+h(+m)                 1.00E+34   -2.2    39597.0
```

```
    Low pressure limit:  0.68050E+25 -0.34500E+01  0.20339E+05
    TROE centering:      0.48030E-05  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
9946. c3h3+c3h3(+m)=c6h5+h(+m)                     3.67E+26   -3.9    28960.0
    Low pressure limit:  0.16970E+49 -0.99800E+01  0.36755E+05
    TROE centering:      0.24430E-01  0.10000E+01  0.99980E+04  0.50110E+04
9947. fulvene(+m)=c6h6(+m)                         1.00E+28   -4.1    83597.2
    Low pressure limit:  0.10000E+31  0.20000E+02  0.12150E+06
    TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+01  0.99980E+04  0.50110E+04
9948. fulvene(+m)=c6h5+h(+m)                       8.51E+24   -3.2    94154.1
    Low pressure limit:  0.10000E+31 -0.50000E-01  0.13117E+06
    TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+01  0.10040E+05  0.58100E+04
9949. c3h3+c3h3(+m)=c6h6(+m)                       1.00E+30   -4.7    13022.2
    Low pressure limit:  0.10000E+31 -0.40000E+01 -0.48480E+03
    TROE centering:      0.45900E+00  0.10000E+01  0.99940E+04  0.66640E+04
9950. c3h3+c3h3(+m)=fulvene(+m)                    1.00E+30   -4.2   176060.7
    Low pressure limit:  0.10000E+31 -0.43700E+01 -0.85173E+04
    TROE centering:      0.14790E+00  0.10000E+01  0.10050E+05  0.50040E+04
    Declared duplicate reaction...
9951. c3h3+c3h3(+m)=fulvene(+m)                    3.20E+28   -5.0     4517.0
    Low pressure limit:  0.10000E+31 -0.37500E+01  0.54320E+04
    TROE centering:      0.78340E+00  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
    Declared duplicate reaction...
9952. c3h3+c3h3(+m)=fulvene(+m)                    5.62E+60  -13.9    27093.0
    Low pressure limit:  0.54920E+69 -0.14730E+02  0.25602E+05
    TROE centering:      0.50000E+00  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
    Declared duplicate reaction...
9953. c3h3+c3h3(+m)=fulvene(+m)                    7.98E+29   -5.5     4665.0
    Low pressure limit:  0.30200E+42 -0.73700E+01  0.59630E+04
    TROE centering:      0.50000E+00  0.10000E+01  0.10000E+05  0.50000E+04
    Declared duplicate reaction...
```

**Jean-Baptiste MAY-CARLE**

## Ethanol et moteur Diesel : mécanismes de combustion et formation des polluants

**Résumé :**

Les mélanges GtL/EMHC/éthanol ont un potentiel important comme carburant alternatif pour moteur Diesel. Néanmoins, l'utilisation de ce type de biocarburant en moteur Diesel nécessite une connaissance précise de la cinétique d'oxydation de ses différents constituants.

Une étude bibliographique approfondie a permis de sélectionner quatre espèces modèles représentatives des mélanges GtL/EMHC/éthanol : le n-décane, l'iso-octane, l'octanoate de méthyle et l'éthanol. L'oxydation de mélanges de ces espèces modèles a ensuite été étudiée en réacteur auto-agité à haute pression (10 atm), pour trois richesses (0,5 ; 1 et 2) et sur un large domaine de température (550-1150 K). L'analyse des échantillons par chromatographie en phase gazeuse a permis de quantifier les principaux produits issus de l'oxydation des mélanges étudiés. Un mécanisme cinétique détaillé capable de reproduire l'oxydation des mélanges n-décane/iso-octane/octanoate de méthyle/éthanol a ensuite été mis au point. Les prédictions du modèle reproduisent de manière satisfaisante les résultats expérimentaux sur toute la gamme de richesse et de température testée en réacteur auto-agité. L'analyse du modèle a également permis de déterminer les voies réactionnelles prépondérantes en fonction de la composition des mélanges.

Enfin, la combustion de mélanges GtL/EMAG/éthanol a été étudiée en moteur monocylindre Diesel. Cette phase d'essais, incluant une analyse approfondie des émissions non réglementées, a permis d'observer l'influence de la formulation des carburants sur l'initiation de la combustion et sur la composition des gaz d'échappements.

**Mots clés** : Biocarburants, combustion, polluants, modélisation cinétique, réacteur auto-agité, banc moteur

## Ethanol and CI engines: combustion mechanisms and pollutants formation

**Abstract:**

As concern about global warming and dependences on fossil fuel grows, there is an increasing interest to shift from traditional fuel to renewable energy sources. Blends of Fischer-Tropsch (F-T) fuels, biodiesel and ethanol seem to be a promising fuel for compression ignition (CI) engine application. The aim of this work is to study and model the impact of these fuels on combustion and pollutant emissions.

In the present study, mixtures of 4 species are proposed to represent the oxidation of F-T/biodiesel/ethanol blends: n-decane, iso-octane, methyl octanoate and ethanol. The kinetic of oxidation of n-decane/iso-octane/methyl octanoate/ethanol blends was studied experimentally in a jet stirred reactor at 10 atm and a constant residence time of 1 s, over the temperature range of 560-1160 K and for three equivalence ratio (0.5, 1 and 2). A kinetic reaction mechanism was developed and used to simulate the oxidation of n-decane/iso-octane/methyl octanoate/ethanol mixtures. The proposed kinetic reaction mechanism yields a good representation of the kinetic of oxidation of the tested biofuel blends. The kinetic analyses allowed identifying the most influencing reactions for the oxidation rate of the fuels.

Finally, four F-T/biodiesel/ethanol blends have been tested on a single cylinder, direct injection, four-stroke Diesel engine. This study, including an analysis of unregulated emissions allowed observing the influence of fuel formulation on combustion and on pollutant emissions. These main engine results tendencies have been compared to the results of the kinetic model.

**Key words**: biofuels, combustion, pollutants, kinetic modelling, jet stirred reactor, engine bench

**ICARE – CNRS – UPR 3021**
**1c avenue de la recherche scientifique**
**45071 Orléans cedex 2**