



HAL
open science

Étude expérimentale et numérique de la cinétique d'oxydation de la fenchone, un additif à haute densité énergétique

Lydia Boualem

► **To cite this version:**

Lydia Boualem. Étude expérimentale et numérique de la cinétique d'oxydation de la fenchone, un additif à haute densité énergétique. Chimie. Université d'Orléans, 2023. Français. NNT: 2023ORLE1078 . tel-04600706v2

HAL Id: tel-04600706

<https://theses.hal.science/tel-04600706v2>

Submitted on 4 Jun 2024

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
ENERGIE, MATERIAUX, SCIENCE DE LA TERRE ET L'UNIVERS

INSTITUT de COMBUSTION, AEROTHERMIQUE,

REACTIVITE et ENVIRONNEMENT

THÈSE présentée par :
Lydia BOUALEM

soutenue le : 5 décembre 2023

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

**Etude expérimentale et numérique de la
cinétique d'oxydation de la fenchone, un additif
à haute densité énergétique**

Discipline/ Spécialité : Chimie physique

THÈSE dirigée par :

G. DAYMA Professeur, Université d'Orléans

RAPPORTEURS :

V. DIAS HDR, Maître de recherche, Université catholique de Louvain

R. FOURNET HDR, Professeur, Université de Lorraine, Nancy

JURY :

V. DIAS HDR, Maître de recherche, Université catholique de Louvain HDR,
R. FOURNET Professeur, Université de Lorraine, Nancy
B. LEFORT Professeur, Université de Bourgogne, Nevers, **Présidente du jury**
A. NICOLLE HDR, Ingénieur de recherche, Rueil-Malmaison
Z. SERINYEL HDR, Maître de conférence, Université d'Orléans
G. DAYMA Professeur, Université d'Orléans

Remerciements

Les travaux de recherche présentés dans ce manuscrit ont été réalisés à l'Institut de Combustion, Aérodynamique, Réactivité et Environnement (ICARE) à Orléans, cette thèse a été financée par le LABEX CAPRYSES (Cinétique chimique et Aérodynamique pour des Propulsions et des Systèmes Energétiques Propres et Surs) (ANR-11-LABX-006-01) et la société Aramco Overseas.

Mes premiers remerciements vont à mes encadrants de thèse : Guillaume DAYMA, Professeur de l'Université d'Orléans, Zeynep SERINYEL, Maître de conférences, Université d'Orléans et André NICOLLE, Ingénieur de recherche chez la société ARAMCO. Je tiens à les remercier pour leur soutien, leurs précieux conseils, leur disponibilité et leur sympathie. Je leur suis également reconnaissante pour toutes les opportunités qu'ils m'ont offertes et pour m'avoir fait bénéficier de leurs nombreuses qualités professionnelles. Je remercie également Fabrice FOUCHER pour son accueil au laboratoire PRISME de l'Université d'Orléans, merci de m'avoir accordé une période pour réaliser mes essais en machine à compression rapide.

Je tiens à remercier M. Philippe DAGAUT pour sa gentillesse, ses conseils et sa disponibilité, je remercie également M. Roland BENOIT pour ses encouragements et pour le temps qu'il m'accordait durant mes pauses.

Un grand merci à mes collègues : Maxence et Giorgia pour leur aide, leur patience et pour m'avoir supporté durant les nombreuses manips.

Je souhaite également exprimer ma reconnaissance aux membres du jury Benoîte LEFORT, Professeure à l'université de Bourgogne, Véronique DIAS, Chargée de recherche à l'Université Catholique de Louvain, René FOURNET, Professeur de l'Université de Lorraine, pour avoir accepté de juger mes travaux de recherche, je les remercie également pour leurs questions et remarques apportées durant ma soutenance.

Un grand merci à mes collègues et amis des différentes équipes et je remercie également l'ensemble du personnel d'ICARE.

J'ai eu la chance de côtoyer des personnes exceptionnelles durant mon parcours de thèse à Orléans, je cite : Hajar, Ahlem, Jean-Noël et Zahra je tiens à les remercier très particulièrement pour leurs encouragements, leur aide, leur patience, ... leur soutien moral et pour m'avoir supporté durant les derniers moments de soutenance, nous avons vécu ensemble les bons et les mauvais moments, je les remercie encore d'être à mes côtés.

Je tiens à remercier également mes amies de longue date, Tina et Djamila, pour leurs messages d'encouragements et leur soutien moral et ce malgré la distance. Je remercie également Zakaria pour ses conseils et ses encouragements durant les moments difficiles au cours de ma thèse et de m'avoir accordé son temps pour me remonter le moral.

Et en dernier je remercie mes collègues de Lyon, ils m'ont encouragée et soutenue jusqu'au jour de ma soutenance. Je remercie infiniment mon copain Mohcine pour son soutien, sa disponibilité, sa patience et pour être toujours présent à mes côtés.

Pour terminer, mes sincères remerciements vont à ma famille : mes parents, mon frère, ma nièce et ma grande sœur qui n'est plus à mes côtés mais toujours dans mon cœur.

Un grand merci à mon père et ma mère pour tous leurs sacrifices, sans oublier leur soutien moral et leurs encouragements durant mon parcours.

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Introduction | 1 |
| 1 Contexte | 1 |
| 2 Cadre et objectifs de la thèse | 5 |
| Chapitre 1 : Bibliographie | 10 |
| 1.1 Les carburants à haute densité énergétique..... | 11 |
| 1.1.1 Fenchone..... | 11 |
| 1.1.2 Carburants polycycliques | 14 |
| 1.1.2.1 Norbornane C ₇ H ₁₂ | 15 |
| 1.1.2.2 Ethylnorbornane | 16 |
| 1.1.2.3 Exo-tétrahydrodicyclopentadiène (JP-10)..... | 18 |
| 1.1.2.4 Les pinènes et le camphène..... | 19 |
| 1.1.2.5 Camphre | 19 |
| 1.2 Impact de la tension de cycle et des substituants (carbonyle, méthyle) | 21 |
| 1.3 Conclusion | 22 |
| Référence du chapitre 1 | 23 |
| Chapitre 2 : dispositifs expérimentaux | 28 |
| 2.1 Le réacteur parfaitement agité par jets gazeux | 29 |
| 2.1.1 Description du réacteur utilisé | 29 |
| 2.1.2 Principe..... | 30 |
| 2.1.3 Calcul du débit des réactifs..... | 31 |
| 2.1.4 Introduction des réactifs | 32 |
| 2.1.5 Prélèvement | 32 |
| 2.1.6 Description des dispositifs d'analyse | 33 |
| 2.1.7 La spectrométrie à Infrarouge à Transformée de Fourier..... | 33 |
| 2.1.8 La chromatographie en phase gazeuse | 34 |
| 2.1.9 Comparaison des résultats en utilisant les différentes méthodes | 36 |
| 2.1.10 Evaluation des incertitudes | 36 |
| 2.2 Machine à Compression Rapide | 37 |
| 2.2.1 Description et principe du montage expérimental..... | 37 |
| 2.2.2 Introduction des réactifs | 39 |
| 2.2.3 Acquisition des données | 39 |
| Références du chapitre 2 | 41 |
| Chapitre 3 : Modélisation | 43 |
| 3.2.1 Fichier “ Mécanisme.inp “ | 44 |

Table des matières

| | | |
|--|---|------------|
| 3.2.2 | Les constantes de vitesse dépendantes de la pression | 45 |
| 3.2.3 | Le fichier de données thermodynamiques “ therm.dat “ | 46 |
| 3.2.4 | Le fichier de données de transport “ tran.dat “ | 47 |
| 3.3.1 | Le modèle de réacteur continu parfaitement agité (Perfectly Stirred Reactor) | 48 |
| 3.3.2 | Le modèle de réacteur homogène fermé (Closed Homogenous Batch Reactor) .. | 49 |
| 3.3.1 | La librairie PREMIX de flamme laminaire prémélangée (Premixed Laminar Flame- Speed) | 50 |
| References du chapitre 3 | | 51 |
| Chapitre 4 | | 53 |
| 4.1 Mécanismes de combustion des hydrocarbures..... | | 54 |
| 4.1.1 Mécanismes de combustion | | 54 |
| 4.1.1.1 | Les réactions d’oxydation à haute température | 54 |
| 4.1.1.2 | Les réactions d’oxydation à basse température | 55 |
| 4.2 Construction du mécanisme cinétique | | 56 |
| 4.2.1 | Principe de fonctionnement du logiciel RMG | 56 |
| 4.2.2 | La représentation des espèces et des groupes fonctionnels | 57 |
| 4.2.3 | Bases de données RMG | 58 |
| 4.2.4 | Discussion sur le mécanisme cinétique développé | 59 |
| 4.2.4.1 | Les réactions de métathèse avec H et le radical CH ₃ | 61 |
| 4.2.4.2 | Réaction de β-scission | 66 |
| 4.2.5 | Changements apportés au mécanisme cinétique | 75 |
| 4.3 Principe de construction d’un mécanisme cinétique | | 77 |
| 4.4 Conclusion..... | | 78 |
| Références du chapitre 4 | | 79 |
| Chapitre 5 | | 82 |
| 5.1 Etude en réacteur parfaitement agité | | 83 |
| 5.1.1 | Interprétation et discussion | 83 |
| 5.1.2 | Analyse de voies réactionnelles | 90 |
| 5.2 Etude expérimentale en machine à compression rapide | | 93 |
| 5.2.1 | Modélisation et simulation des délais d’auto-inflammation..... | 99 |
| 5.2.2 | Analyse de sensibilité sur l’auto-inflammation de la fenchone | 101 |
| 5.3 | Conclusion | 103 |
| Références du chapitre 5 | | 104 |
| Conclusion et perspectives | | 105 |

Table des matières

| | |
|--|------------|
| Références bibliographiques | 107 |
| Annexes | 117 |

Listes des figures, tableaux

Listes des figures

| | |
|---|----|
| Figure 1: Technologies de mobilité décarbonées [3]..... | 1 |
| Figure 2: Synthèse des hydrocarbures à cycles tendus à partir de matières premières fossiles. | 2 |
| Figure 3: Synthèse des hydrocarbures à cycles tendus à partir de matières premières renouvelables..... | 3 |
| Figure 4: Dimérisation et l'isomérisation de β -pinène. | 3 |
| | |
| Figure 1. 1 : Structure de la L-fenchone (à gauche) et la configuration chaise (à droite). | 11 |
| Figure 1.2 : Vitesse de flamme laminaire de la l-fenchone /air à 453 K et 1 atm en fonction de la richesse [5]. | 13 |
| Figure 1.3 : Positionnement de la fenchone dans l'espace des propriétés du carburant (RON (nombre d'octane recherche, température d'ébullition à 1 atm, pouvoir calorifique, indice de suies YSI unifié) vis-à-vis d'autres hydrocarbures cycliques [27]. | 14 |
| Figure 1.4 : Structure du norbornane (bicyclo [2-2-1] heptane) (à gauche) C_7H_{12} et la configuration bateau (à droite). | 15 |
| Figure 1.5 : Radicaux norbornyles obtenus par métathèse. | 16 |
| Figure 1.6 : Radicaux produits par β -scission. | 16 |
| Figure 1.7 : Structure 2-ethylbicyclo [2.2.1] heptane. | 16 |
| Figure 1.8: Pyrolyse du bicyclo[2-2-1]hept-2-ène(Norbornène). | 17 |
| Figure 1.9 : Structure de l'exo-tétrahydrodicyclopentadiène..... | 18 |
| Figure 1.10 : Structure du camphre $C_{10}H_{16}O$ | 19 |
| Figure 1. 11 : Voies photochimiques et thermiques de décomposition du camphre identifiées par Sato et Obase [33]..... | 20 |
| | |
| Figure 2. 1: Réacteur auto agité utilisé dans le cadre de ce travail. 1:Réacteur auto agité utilisé dans le cadre de ce travail. | 30 |
| Figure 2. 2: Spectre infrarouge de la fenchone à T cellule = 145° C, P=200 mbar. | 34 |
| Figure 2. 3: Comparaison des résultats obtenus pour le méthane et l'éthylène suivant les différents dispositifs d'analyse pour 1000 ppm de fenchone à 10 atm, $\tau=0.7s$ et $\phi=1$ | 36 |
| Figure 2. 4: Schéma de la MCR de PRISME (Université d'Orleans). | 38 |
| Figure 2. 5: Profil de pression d'un essai réalisé en machine à compression rapide ($\phi=0,5$, $T_c=794$ K, $P_c=39,62$ bar, diluent (Ar 70% -N ₂ =30%)). | 40 |
| | |
| Figure 3. 1: L'évolution des constantes de vitesse selon les trois régimes liés à la pression [6]. | 45 |

Listes des figures, tableaux

| | |
|---|-----|
| Figure 4. 1: Différentes voies de réactions à basse température pour un alcane [85]. | 55 |
| Figure 4. 2: Description des listes d'adjacences pour le cas du méthane. | 57 |
| Figure 4. 3: Structure de la fenchone et emplacement des radicaux primaires (a), structure du norbornane (b). | 60 |
| Figure 4. 4: Radicaux obtenus par métathèse sur la fenchone, ainsi que les énergies de liaison menant à la formation des radicaux en kcal.mol ⁻¹ [95]. | 60 |
| Figure 4. 5 : Comparaison des constantes de vitesse de métathèse par l'atome hydrogène H (à gauche) et par le radical méthyle CH ₃ (à droite) pour former F1(en haut) et F2 (en bas) proposées par le RMG avec celles qui servent de références. | 62 |
| Figure 4. 6: Comparaison des constantes de vitesse des réactions d'abstraction par l'atome H (à droite) et par le radical méthyle, CH ₃ , (à gauche) pour former les radicaux F3 et F4. | 63 |
| Figure 4. 7: Constantes de vitesse pour les réactions d'abstraction d'hydrogène par l'atome d'hydrogène (à gauche) et OH (à droite). La constante de vitesse de F3 et celles de F4 sont censées être identiques, tandis que celle de F6 est deux fois plus élevée que celle de F5. | 65 |
| Figure 4. 8 : Voies de décompositions du radical F1 | 67 |
| Figure 4. 9: Voies de décompositions du radical F2. | 68 |
| Figure 4. 10: Voies de décompositions du radical F3. | 69 |
| Figure 4. 11: Voies de décompositions du radical F4. | 70 |
| Figure 4. 12: Voies de décompositions du radical F5. | 71 |
| Figure 4. 13: Voies de décompositions du radical F6. | 72 |
| Figure 4. 14: Structure hiérarchique d'un mécanisme cinétique. | 77 |
| | |
| Figure 5. 1: Evolution de la fraction molaire de la fenchone en fonction de la température selon trois conditions de richesse différentes à $p = 10$ atm, $\tau = 0,7$ s, $X_{f,0} = 1000$ ppm. | 84 |
| Figure 5. 2: Evolution des fractions molaires du benzène en fonction de la température pour trois conditions de richesse ($\varphi=0,5-1-2$), à $p = 10$ atm, $\tau = 0,7$ s. | 85 |
| Figure 5. 3: Résultats obtenus en milieu pauvre $\varphi = 0,5$ en réacteur parfaitement agité à 10 atm, $\tau = 0,7$ s, pour 1000 ppm de fenchone. | 86 |
| Figure 5. 4: Résultats obtenus en milieu stœchiométrique $\varphi = 1$ en réacteur parfaitement agité à 10 atm, $\tau = 0,7$ s, pour 1000 ppm de fenchone. | 87 |
| Figure 5. 5: Résultats obtenus en milieu riche $\varphi = 2$ en réacteur parfaitement agité à 10 atm, $\tau = 0,7$ s, pour 1000 ppm de fenchone. | 88 |
| Figure 5. 6 : Analyse des voies d'oxydation de la fenchone à $\varphi = 1$, $p = 10$ atm, $\tau = 0,7$ s et $T = 850$ K (L'épaisseur des flèches indique l'intensité du flux de carbone au sein du réseau réactionnel, c'est-à-dire la vitesse volumique molaire de conversion d'une espèce en une espèce adjacente du réseau). | 90 |
| Figure 5. 7 : Voies de formation du benzène à $p = 10$ atm et $\tau = 0,7$ s. | 92 |
| Figure 5. 8: Effet de la richesse sur l'évolution des délais d'auto-inflammation. | 94 |
| Figure 5. 9: Comparaison entre les profils de pression expérimentaux avec ceux obtenus par simulation pour le mélange non-réactif (fenchone/Ar 0,3 - N ₂ 0,7), $\varphi = 0,5$, $T_0 = 96,5$ °C et $P_0 = 2,059$ bar. | 99 |
| Figure 5. 10: Délai d'auto-inflammation des mélanges fenchone/O ₂ /diluant à la richesse 0,5 et 1. | 100 |
| Figure 5. 11: Analyse de sensibilité sur OH durant l'auto-inflammation du mélange stœchiométrique fenchone/O ₂ /diluant, $T_c = 875$ K, $p_c = 40$ bar, à 20% de consommation de fuel. | 101 |

Listes des figures, tableaux

| | |
|---|-----|
| Figure 5. 12 : Analyse de sensibilité sur HO ₂ durant l'auto-inflammation du mélange stœchiométrique fenchone/O ₂ /diluent, $T_c = 875$ K, $P_c = 40$ bars, à 20% de consommation de carburant. | 102 |
|---|-----|

Listes des figures, tableaux

Listes des tableaux

| | |
|---|----|
| Tableau 1. 1: Propriétés physico-chimiques de la fenchone C ₁₀ H ₁₆ O. | 12 |
| Tableau 2. 1: Système analytique utilisé dans le cadre de ce travail. | 35 |
| Tableau 2. 2: Caractéristiques de la MCR utilisées dans le cadre de cette étude. | 39 |
| Tableau 4. 1: Paramètres d'Arrhenius pour les constantes de vitesse des réactions de métathèse avec H et CH ₃ | 61 |
| Tableau 4. 2: Paramètres cinétiques (unités en cm, mol, cal, s) des réactions d'abstraction par O, OH, HO ₂ | 64 |
| Tableau 4. 3: Constantes de vitesse du mécanisme de la fenchone (A :cm ³ . mol ⁻¹ .s ⁻¹ ,Ea :cal.mol ⁻¹). | 74 |
| Tableau 4. 4: Liste des réactions les plus sensibles pour le calcul du délai d'auto-inflammation aux basses températures. | 76 |
| Tableau 5. 1: Compositions des mélanges utilisés pour les expériences en RCM. | 93 |
| Tableau 5. 2: Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en machine à compression rapide pour $\phi = 0,5$, $p_c = 40$ bar, diluant (Ar =30%-N ₂ =70 %),(Ar =60%-N ₂ =40 %). | 96 |
| Tableau 5. 3: Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en machine à compression rapide à $\phi = 0,5$, $p_c = 40$ bar, diluent (Ar =70%-N ₂ =30 %),(Ar =80%-N ₂ =20 %). | 97 |
| Tableau 5. 4: Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en machine à compression rapide à $\phi = 1$, $p_c = 40$ bar, diluant (Ar =30%-N ₂ =70 %), (Ar =50%-N ₂ =50 %),(Ar =70%-N ₂ =30 %). | 98 |
| Tableau 5. 5: Composition des diluants à $\phi = 0,5$ et $\phi = 1$ | 99 |

Abréviations et nomenclatures

Abréviations et nomenclatures

| | |
|--|---|
| FID | Détecteur à ionisation de flamme |
| GC-MS | Chromatographie en phase gazeuse-Spectromètre de masse |
| TCD | Détecteur à conductivité thermique |
| FTIR | Infrarouge à Transformé de Fourier |
| HPLC | Chromatographie liquide à haute pression |
| CP-SIL | Colonne ChromPack-DiméthylpolySiloxane |
| CP-Al ₂ O ₃ -KCl | Colonne d'oxyde d'aluminium ChromPack désactivée par le chlorure de potassium |
| CP-Carboplot-P7 | Colonne tubulaire ouverte ChromPack à couche poreuse à base de carbone |
| JSR | Réacteur auto-agité par jets gazeux |
| MCR | Machine à Compression Rapide |
| P | Pression en atm |
| ϕ | Richesse |
| T | Température en K |
| τ | Temps de passage en s |
| m | Masse de ce composé en kg |
| M | Masse molaire du composé en kg.mol ⁻¹ |
| R | Constante des gaz parfaits 8,314 J.K ⁻¹ .mol ⁻¹ |
| ρ | Masse volumique du composé liquide en kg.m ⁻³ |
| V _r | Volume du réacteur en m ³ |
| Q _e | Débit volumique total entrant dans le réacteur m ³ . s ⁻¹ |
| T ₀ | Température ambiante en K |
| P ₀ | Pression ambiante en atm |
| P | Pression au sein du réacteur en atm |
| T | Température du réacteur. |
| P _c | Pression de fin de compression, |
| γ | Rapport des capacités calorifiques |
| C _p | Capacité calorifique à pression constante |
| C _v | Capacité calorifique à volume constant |
| k | Constante de vitesse |
| A | Facteur pré exponentiel |
| T | Température en K |
| E _a | L'énergie d'activation de la réaction |
| R | Constante des gaz parfaits |
| n | Facteur traduisant la déviation d'un comportement d'Arrhenius idéal |
| G | Enthalpie libre |
| S | Entropie |
| H | Enthalpie |
| ω_i | Vitesse molaire nette de réaction de l'espèce i |
| W _i | Masse molaire de l'espèce i |
| D _i | Coefficient de diffusion |

Introduction

Introduction

Introduction

Introduction

1 Contexte

Une voie de décarbonation des transports est l'électrification des véhicules légers. En fonction de la décarbonation de l'électricité et des émissions liées à la production des batteries, l'électrification peut conduire à une réduction des émissions nettes de CO₂ dans le secteur des transports [1-2]. Une autre voie de décarbonation des transports est l'utilisation de carburants synthétiques à faibles émissions CO₂ nettes [3]. La mise en œuvre de ces nouveaux carburants nécessite une reformulation pour atteindre la qualité de carburant requise [4].

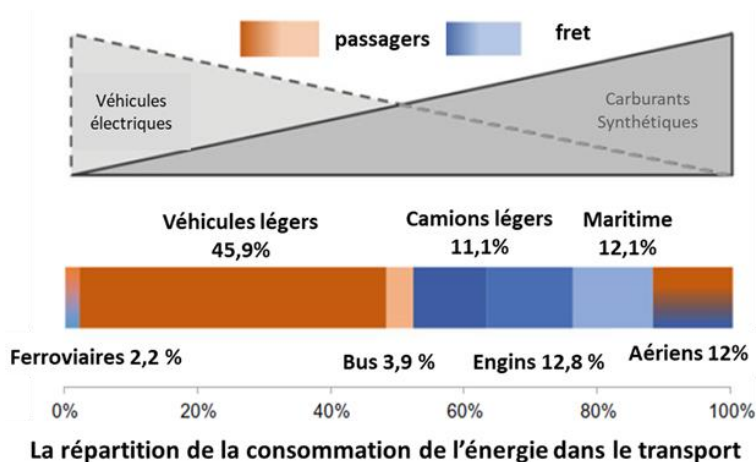


Figure 1: Technologies de mobilité décarbonées [3].

La formulation d'additifs multifonctionnels issus des terpènes cycliques [5] est une solution pour améliorer simultanément plusieurs propriétés des carburants automobiles. L'augmentation de la densité énergétique des carburants constitue un moyen potentiel de réduire les émissions spécifiques de CO₂ à l'échappement.

Récemment, le passage des ressources fossiles conventionnelles à la biomasse a fait l'objet d'une attention particulière afin de réduire les émissions de gaz à effet de serre malgré un approvisionnement limité [6]. À la différence des biocarburants BtL composés principalement d'alcane linéaires ou ramifiés [7], les biocarburants à haute densité énergétique mettent en œuvre des alcanes multicycliques pour obtenir une densité plus élevée.

Par conséquent, une synthèse spécifique est nécessaire pour construire une telle structure moléculaire. Dans ce domaine, de nombreux efforts ont été réalisés et certains biocarburants synthétisés à partir de ressources dérivées de la biomasse présentent un bon potentiel en tant que carburants liquides à haute densité énergétique [8].

Introduction

Les hydrocarbures à cycle tendus sont intéressants en tant que composants à haute densité énergétique dans les systèmes de transport pour autant qu'ils ne dégradent pas les propriétés des carburants de façon rédhibitoire par rapport aux spécifications, voire confèrent des propriétés plus intéressantes. Cependant, la synthèse des biocarburants polycycliques à haute densité énergétique est de plus en plus compliquée. Jusqu'à présent, de nombreuses molécules plateformes dérivées de la biomasse ont été utilisées pour produire des biocarburants à haute densité énergétique. Ils peuvent être produits en quantités relativement abondantes à partir de matières premières fossiles [9] par cyclisation des hydrocarbures suivi d'une réaction de Diels-Alder et une oxydation.

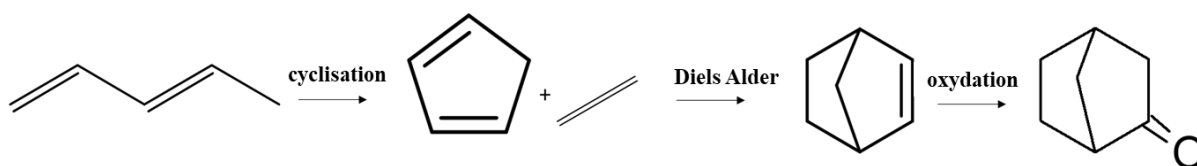


Figure 2: Synthèse des hydrocarbures à fonctionnalités oléfiniques à partir de matières premières fossiles.

Ils peuvent également être produits à partir des terpènes qui constituent une classe importante et diversifiée de composés organiques, produits par une grande diversité de plantes, en particulier les conifères [10]. Plusieurs exemples de conversion des terpènes pour la propulsion ont été rapportés [11- 12]. La structure moléculaire polycyclique présente dans les terpènes offre une probabilité à concevoir et fabriquer des biocarburants de haute densité énergétique. Les terpènes tels que l' α -pinène, le β -pinène, le camphène et le limonène (avec une densité de 0,841-0,859 g.mL⁻¹) sont des composants importants de la résine de pin et sont actuellement produits à l'échelle industrielle, soit de manière non destructive par l'entaillage des arbres (térébenthine de gomme), soit comme sous-produit de la mise en pâte du papier (térébenthine de sulfate brute - CST) [13]. Avec une structure compacte et des fonctionnalités oléfines réactives, l'hydrogénation directe des terpènes peut produire un carburant à haute densité énergétique. Un exemple est présenté par la *figure 3* qui montre la synthèse du camphre par isomérisation de l' α -pinène suivi d'une estérification du camphène et hydrolyse [14].

Introduction

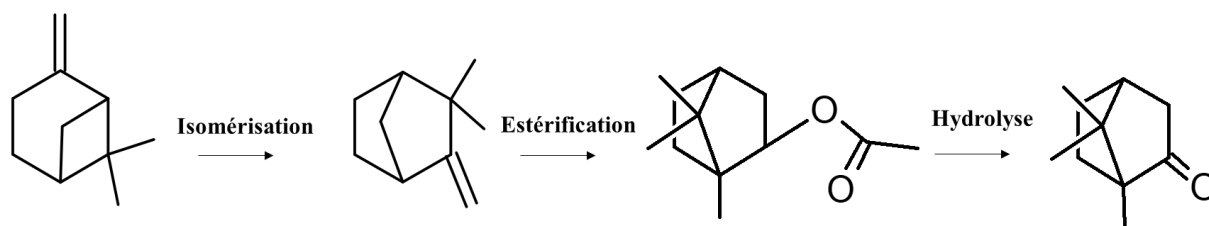


Figure 3: Synthèse des hydrocarbures à cycles tendus à partir de matières premières renouvelables.

Meylmans et al [14] ont exploré la dimérisation de β -pinène avec un mélange de terpènes (α -pinène, camphène et le limonène) à l'aide de catalyseurs acides hétérogènes pour produire une distribution complexe de molécules C_{20} , (*figure 4*).

Le β -pinène a été choisi comme point de départ en raison de la facilité de dimérisation permise par sa double liaison exocyclique. Les structures et les quantités relatives d'isomères présents avant la dimérisation sont des considérations importantes pour la synthèse de ces carburants à haute densité.

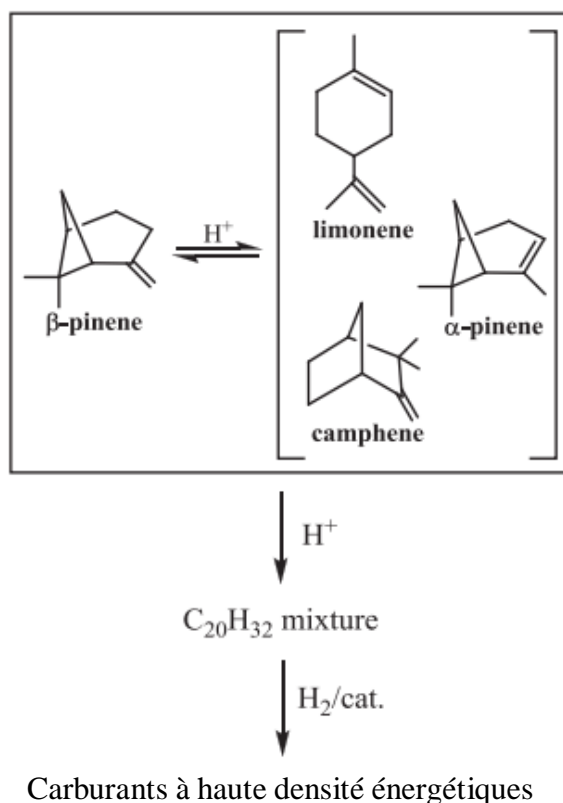


Figure 4: Dimérisation et l'isomérisation de β -pinène.

Introduction

L'utilisation potentielle de mélanges et d'additifs nécessite une connaissance approfondie de la cinétique de combustion des composants émergents ainsi que de la nature et de la quantité de polluants formés lors de leur oxydation et de leur décomposition thermique. Ils peuvent être utilisés dans des mélanges conventionnels comme carburant d'appoint.

Les caractéristiques de combustion des hydrocarbures à cycles tendus ne sont pas suffisamment étudiées. Parmi ces hydrocarbures, le JP-10 (principalement de l'endo-tétrahydrodicyclopentadiène), produit par hydrogénation catalytique du dicyclopentadiène, est probablement le plus étudié[15]. Cependant, l'impact de ces hydrocarbures sur les caractéristiques de la suie produite reste à déterminer [16]. La fonctionnalisation de ces additifs à cycles tendus avec des groupes contenant de l'oxygène, tels que les alcools ou les cétones, peut contribuer à réduire davantage la propension à la formation de suie de ces additifs [17], mais au détriment du pouvoir calorifique des hydrocarbures à cycle tendus.

Plusieurs études semblent indiquer que les bicycloalcanes avec des cycles à 5 carbones, conduisent à des suies plus amorphes que celles d'un carburant commercial, donc plus faciles à post-oxyder. Néanmoins, l'oxydation des polycycliques oxygénés a été beaucoup moins explorée. Parmi ses dérivés, on retrouve notamment le camphre et la fenchone qui présentent un potentiel intéressant, pouvant être considérés comme des hydrocarbures à forte densité énergétique. La présente étude se propose notamment de documenter les premières étapes réactionnelles en phase gazeuse menant à la formation des suies lors de la combustion de la fenchone.

Introduction

2 Cadre et objectifs de la thèse

Cette thèse a été financée par le LABEX CAPRYSES (Cinétique chimique et Aérodynamique pour des Propulsions et des Systèmes Energétiques Propres et Surs) (ANR-11-LABX-006-01) et la société Aramco Overseas.

La fenchone présente une forte viscosité (1,99 mm²/s), une forte densité (0,94 à 25°C), une faible solubilité dans l'eau (731 mg. L⁻¹ à 25°C), un indice d'octane de l'ordre de 95, un PCI de 38 MJ/kg. Il s'agit donc d'un additif multifonctionnel potentiel avec une volatilité faible (BP 194°C, typique du BP final du naphta lourd). De plus, son potentiel de production à partir des fractions C₅ des mélanges de vapocraquage du naphta mais aussi à partir de sources naturelles (par exemple l'huile de fenouil) est important [18-19] Les cétones bicycliques peuvent également être considérées comme des intermédiaires dans la combustion des bicyclohydrocarbures, ce qui permet de mieux comprendre les mécanismes de combustion associés [20]. La distorsion des liaisons (délocalisation de la liaison C-C, orbitales occupées très étendues) implique une gêne stérique pour l'isomérisation des peroxydes, et l'ouverture de cycle, offrant un levier supplémentaire pour contrôler les propriétés du carburant si ces mécanismes sont mieux compris.

Le premier objectif de ce travail est de caractériser et quantifier la cinétique de combustion en phase gazeuse de la fenchone en fonction des conditions opératoires (température, pression et richesse) afin de rationaliser les importances respectives des voies réactionnelles mises en jeu. Etudier la combustion de la fenchone n'est pas seulement utile d'un point de vue industriel mais aussi important pour la chimie fondamentale. Le deuxième objectif de ce travail est précisément le développement et la validation d'un schéma cinétique permettant de représenter les voies principales de consommation de la fenchone dans des conditions de réacteur ouvert (réacteur agité) ou à volume variable (machine à compression rapide). Ces connaissances seront capitalisées dans des modèles prédictifs pour l'optimisation carburant / moteur. Ce travail nécessite la connaissance des paramètres cinétiques de chacun des processus élémentaires du mécanisme réactionnel ainsi que des propriétés thermodynamiques des espèces impliquées dans le modèle.

Introduction

Ce présent manuscrit sera divisé en cinq parties :

- Le premier chapitre consiste en une synthèse bibliographique des particularités liées aux différents combustibles liquides à haute densité énergétique et les études trouvées sur la pyrolyse et l'oxydation du carburant préalablement choisis dans le cadre de notre travail pour ses propriétés physicochimiques.
- La description des dispositifs expérimentaux utilisés au cours de cette thèse se trouve dans le deuxième chapitre :
 - Réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) à ICARE.
 - Machine à compression rapide (MCR) à PRISME.
- Le troisième chapitre décrit les outils numériques utilisés, afin de mener à bien ce travail, et afin de reproduire les résultats expérimentaux obtenus.
- Le chapitre quatre décrit le mécanisme cinétique développé dans le cadre de notre travail, en s'appuyant sur un outil numérique, RMG (Reaction Mechanism Generator), permettant de générer des données cinétiques et thermodynamiques. Également des corrélations de types structure/réactivité ont été utilisées avec des hydrocarbures similaires et seront présentées en détail.
- Le chapitre cinq est consacré aux résultats expérimentaux obtenus au cours de l'étude expérimentale lors de l'oxydation de la fenchone en réacteur à jets gazeux et en machine à compression rapide et la confrontation du modèle avec les résultats expérimentaux afin de valider notre approche.
- Le dernier chapitre clôture le travail réalisé dans le cadre de ma thèse par une conclusion, des perspectives seront également évoquées sur des travaux envisageables.

Introduction

- [1] F. Ausfelder et K. Wagemann, « Power-to-Fuels: E-Fuels as an Important Option for a Climate-Friendly Mobility of the Future », *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 92, n° 1-2, p. 21-30, janv. 2020, doi: 10.1002/cite.201900180.
- [2] A. F. N. Abdul-Manan, V. Gordillo Zavaleta, A. K. Agarwal, G. Kalghatgi, et A. A. Amer, « Electrifying passenger road transport in India requires near-term electricity grid decarbonisation », *Nat Commun*, vol. 13, n° 1, Art. n° 1, avr. 2022, doi: 10.1038/s41467-022-29620-x.
- [3] A. Tremel, *Electricity-based Fuels*. in SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology. Cham: Springer International Publishing, 2018. doi: 10.1007/978-3-319-72459-1.
- [4] F. Hoppe *et al.*, « Tailor-made fuels for future engine concepts », *International Journal of Engine Research*, vol. 17, n° 1, p. 16-27, janv. 2016, doi: 10.1177/1468087415603005.
- [5] P. Hellier, L. Al-Haj, M. Talibi, S. Purton, et N. Ladommatos, « Combustion and emissions characterization of terpenes with a view to their biological production in cyanobacteria », *Fuel*, vol. 111, p. 670-688, sept. 2013, doi: 10.1016/j.fuel.2013.04.042.
- [6] D. McCollum et C. Yang, « Achieving deep reductions in US transport greenhouse gas emissions: Scenario analysis and policy implications », *Energy Policy*, vol. 37, n° 12, p. 5580-5596, déc. 2009, doi: 10.1016/j.enpol.2009.08.038.
- [7] J.-B. May-Carle, L. Pidol, A. Nicolle, J. M. Anderlohr, C. Togbé, et P. Dagaut, « Experimental and Numerical Study of F-T/Biodiesel/Bioethanol Surrogate Fuel Oxidation in Jet-Stirred Reactor », *Combustion Science and Technology*, vol. 184, n° 7-8, p. 901-915, juill. 2012, doi: 10.1080/00102202.2012.663982.
- [8] B. G. Harvey, M. E. Wright, et R. L. Quintana, « High-Density Renewable Fuels Based on the Selective Dimerization of Pinenes », *Energy Fuels*, vol. 24, n° 1, p. 267-273, janv. 2010, doi: 10.1021/ef900799c.
- [9] V. Sh. Fel'dblyum, T. N. Antonova, et N. S. Zefirov, « Cyclization and dehydrocyclization of C5 hydrocarbons over platinum nanocatalysts and in the presence of hydrogen sulfide », *Dokl Chem*, vol. 424, n° 2, p. 27-30, févr. 2009, doi: 10.1134/S0012500809020025.
- [10] E. V. Gusevskaya, « Reactions of Terpenes Catalyzed by Heteropoly Compounds: Valorization of Biorenewables », *ChemCatChem*, vol. 6, n° 6, p. 1506-1515, juin 2014, doi: 10.1002/cctc.201400052.
- [11] R. Mawhood, E. Gazis, S. De Jong, R. Hoefnagels, et R. Slade, « Production pathways for renewable jet fuel: a review of commercialization status and future prospects:

Introduction

- Renewable jet fuel technologies: commercialisation status and future prospects », *Biofuels, Bioprod. Bioref.*, vol. 10, n° 4, p. 462-484, juill. 2016, doi: 10.1002/bbb.1644.
- [12] A. Behr et L. Johnen, « Myrcene as a Natural Base Chemical in Sustainable Chemistry: A Critical Review », *ChemSusChem*, vol. 2, n° 12, p. 1072-1095, déc. 2009, doi: 10.1002/cssc.200900186.
- [13] A. Behr et L. Johnen, « Myrcene as a Natural Base Chemical in Sustainable Chemistry: A Critical Review », *ChemSusChem*, vol. 2, n° 12, p. 1072-1095, déc. 2009, doi: 10.1002/cssc.200900186.
- [14] H. A. Meylemans, R. L. Quintana, et B. G. Harvey, « Efficient conversion of pure and mixed terpene feedstocks to high density fuels », *Fuel*, vol. 97, p. 560-568, juill. 2012, doi: 10.1016/j.fuel.2012.01.062.
- [15] J. Xie *et al.*, « Synthesis of high-density liquid fuel via Diels-Alder reaction of dicyclopentadiene and lignocellulose-derived 2-methylfuran », *Catalysis Today*, vol. 319, p. 139-144, janv. 2019, doi: 10.1016/j.cattod.2018.04.053.
- [16] M. R. Raupach *et al.*, « Global and regional drivers of accelerating CO₂ emissions », *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 104, n° 24, p. 10288-10293, juin 2007, doi: 10.1073/pnas.0700609104.
- [17] E. J. Barrientos, M. Lapuerta, et A. L. Boehman, « Group additivity in soot formation for the example of C-5 oxygenated hydrocarbon fuels », *Combustion and Flame*, vol. 160, n° 8, p. 1484-1498, août 2013, doi: 10.1016/j.combustflame.2013.02.024.
- [18] F. P. Perera, « Multiple Threats to Child Health from Fossil Fuel Combustion: Impacts of Air Pollution and Climate Change », *Environmental Health Perspectives*, vol. 125, n° 2, p. 141-148, févr. 2017, doi: 10.1289/EHP299.
- [19] K. Mukhopadhyay, K. M. Krishna, et M. Sharon, « Fullerenes from camphor: A natural source », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, n° 20, p. 3182-3185, mai 1994, doi: 10.1103/PhysRevLett.72.3182.
- [20] G. Oza *et al.*, « Camphor-mediated synthesis of carbon nanoparticles, graphitic shell encapsulated carbon nanocubes and carbon dots for bioimaging », *Sci Rep*, vol. 6, n° 1, Art. n° 1, févr. 2016, doi: 10.1038/srep21286.

Chapitre I

Bibliographie

Chapitre 1 : Bibliographie

| | |
|--|-----------|
| Chapitre 1 : Bibliographie..... | 10 |
| 1.1 Les carburants à haute densité énergétique..... | 11 |
| 1.1.1 Fenchone..... | 11 |
| 1.1.2 Carburants polycycliques | 14 |
| 1.1.2.1 Norbornane C ₇ H ₁₂ | 15 |
| 1.1.2.2 Ethylnorbornane | 16 |
| 1.1.2.3 Exo-tétrahydrodicyclopentadiène (JP-10)..... | 18 |
| 1.1.2.4 Les pinènes et le camphène..... | 19 |
| 1.1.2.5 Camphre | 19 |
| 1.2 Impact de la tension de cycle et des substituants (carbonyle, méthyle) | 21 |
| 1.3 Conclusion | 22 |
| Référence du chapitre 1..... | 23 |

Chapitre 1 : Bibliographie

Ce premier chapitre sera consacré à la description des carburants à haute densité énergétique, notamment une synthèse sur les carburants polycycliques terpéniques et cétoniques et des travaux antérieurs seront évoqués concernant la pyrolyse et l'oxydation de ces composés.

Chapitre 1 : Bibliographie

1.1 Les carburants à haute densité énergétique

Les combustibles liquides à haute densité énergétique ont attiré une grande attention de la communauté de la combustion en raison de leur potentiel comme carburant pour les moteurs ou comme additifs pour les carburants conventionnels. Dans la suite de ce chapitre, différentes études de la littérature sur des espèces polycycliques seront évoquées. Parmi les hydrocarbures polycycliques les plus étudiés dans la littérature on trouve le norbornane C_7H_{12} .

Dans ce qui suit, une bibliographie sur la pyrolyse et l'oxydation des carburants polycycliques sera présentée.

1.1.1 Fenchone

▪ Potentiel de la fenchone comme carburant

La fenchone est un monoterpène cyclique sous les dénominations chimiques : 1,3,3-triméthylbicyclo [2.2.1] heptan-2-one, ou d-1,3,3-triméthyl-2-norbonanone, classée à la fois comme monoterpène et cétone, de formule chimique $C_{10}H_{16}O$. Il existe deux énantiomères de la fenchone ; la D-fenchone est l'énantiomère (1*S*,4*R*) dextrogyre (+), et la L-fenchone est l'énantiomère (1*R*,4*S*) et est lévogyre (-). Dans le cadre de ce travail l'étude expérimentale a été menée sur la L-fenchone, *figure 1.1*.

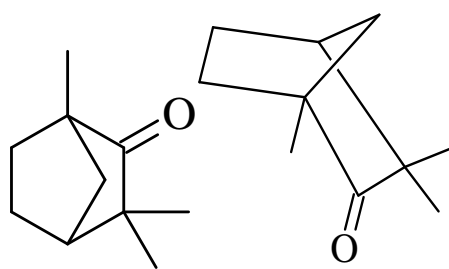


Figure 1. 1 : Structure de la L-fenchone (à gauche) et la configuration chaise (à droite).

Chapitre 1 : Bibliographie

Cet additif présente des caractéristiques physico-chimiques résumées dans le **tableau 1.1**[21].

Tableau 1. 1:Propriétés physico-chimiques de la fenchone C₁₀H₁₆O.

| | |
|-----------------------------------|----------------------------|
| Densité | 0.94 |
| Pouvoir calorifique inférieur PCI | 38 MJ.kg ⁻¹ |
| Pouvoir calorifique supérieur PCS | 42 MJ.kg ⁻¹ |
| Point d'ébullition | 467,15 K |
| Masse molaire | 0,152 kg.mol ⁻¹ |
| Indice d'octane | RON=93, MON=81 [22] |

L'enthalpie de formation à 298 K de la fenchone a été évaluée par le biais de réactions isodesmiques à -257,52 kJ.mol⁻¹. La pression de vapeur saturante de la fenchone en fonction de la température est représentée par l'équation d'Antoine dont les coefficients sont calculés par le NIST [23] et valables pour des températures comprises entre 301-464 K.

$$\log(P) = 4,76003 - \frac{2055,813}{T - 31,729}$$

P : pression de vapeur saturante exprimée en bar et la température en K.

Structurellement, la fenchone est un norbornane substitué avec un groupe fonctionnel cétone et trois groupes méthyliques supplémentaires. C'est un constituant qu'on peut trouver dans l'absinthe (sa concentration < 5 mg. L⁻¹) ainsi que dans les huiles essentielles de graines de fenouils à des concentrations variables selon l'espèce de fenouil et le lieu d'origine. Selon la pharmacopée européenne, l'huile essentielle de fenouil amer produite à partir des parties aériennes de la plante (*Foeniculum Vulgare*) peut contenir entre 7 et 25 % de fenchone et l'huile essentielle de fenouil amer produite à partir des fruits de la plante peut contenir entre 12 et 25 % de fenchone. Ce monoterpène est utilisé comme matière première pour la fabrication des arômes dans les aliments et en parfumerie, également utilisée dans l'industrie alimentaire, dans les boissons comme conservateur et dans les détergents et savons [24].

Chapitre 1 : Bibliographie

Les recherches bibliographiques relatives à la fenchone montrent que très peu d'études et travaux thermocinétiques ont été réalisés sur ce composé. La seule étude en réacteur idéal reportée est celle de Coudour et al [25] qui, dans le contexte des COV impliqués dans les feux de forêt, ont étudié la pyrolyse flash de la fenchone et la vitesse de propagation de flammes laminaires en chambre sphérique pour différentes conditions de richesses. Les résultats obtenus permettront une meilleure compréhension des feux de forêt en prenant en compte la combustion des composés organiques volatils.

La *figure 1.2* présente les vitesses de flamme de la fenchone comparées aux résultats expérimentaux des composés trouvés dans la littérature : α - pinene et JP-10.

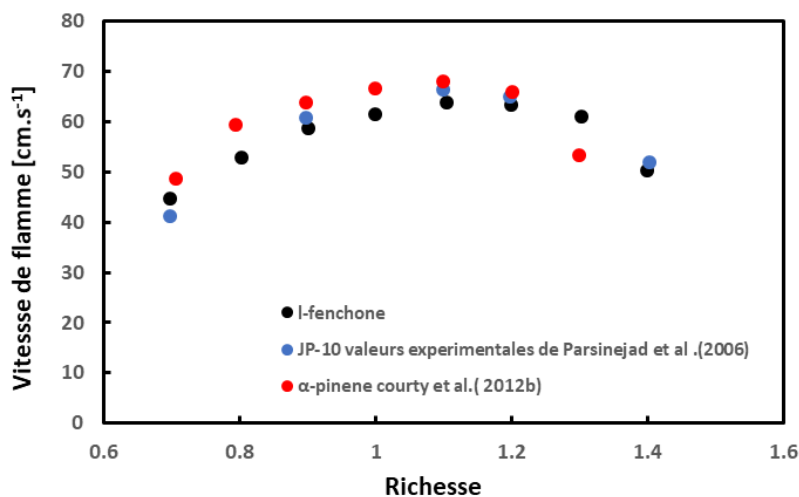


Figure 1.2 : Vitesse de flamme laminaire de la l-fenchone /air à 453 K et 1 atm en fonction de la richesse [25].

Les valeurs expérimentales de JP-10 ont été obtenues par Parsinejad et al. [26] et celles de α -pinene par Country et al. [27]. Ils ont observé que les vitesses de combustion laminaire de la L-fenchone correspondent aux résultats du JP-10 pour des richesses comprises entre 0,7 et 1,2. Pour des richesses plus élevées, les valeurs de L-fenchone deviennent supérieures à celles de l' α -pinène, mais se rapprochant des valeurs du JP-10. La vitesse maximale de la L-fenchone est atteinte à $\phi = 1,1$ et en mélange pauvre la vitesse est comprise entre 40 cm.s^{-1} et 50 cm.s^{-1} .

Chapitre 1 : Bibliographie

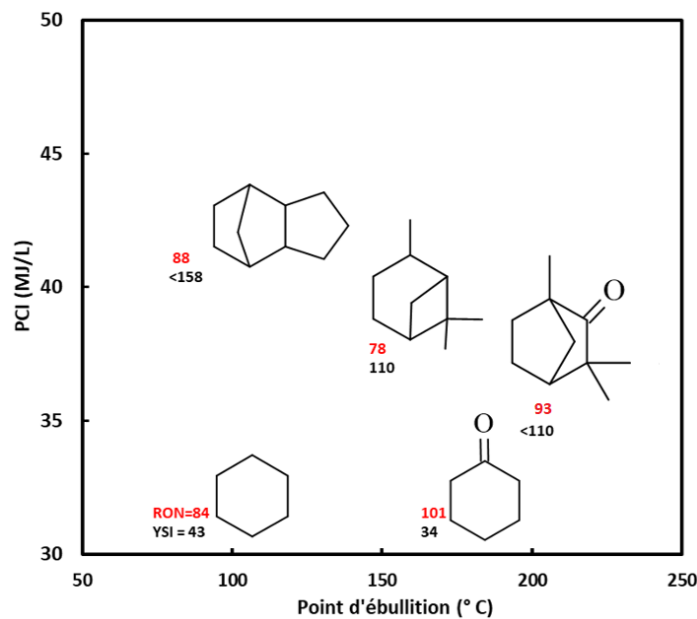


Figure 1.3 : Positionnement de la fenchone dans l'espace des propriétés du carburant (RON (nombre d'octane recherche, température d'ébullition à 1 atm, pouvoir calorifique, indice de suies YSI unifié) vis-à-vis d'autres hydrocarbures cycliques [28].

La *figure 1.3* illustre que l'introduction d'une fonction cétone sur le 1,3,3 triméthylnorbornane permet d'accroître l'indice d'octane, tout en diminuant sa volatilité et ses émissions de suie [29] et en assurant un pouvoir calorifique qui est supérieur à ceux du cyclohexane et du cyclopentane (respectivement 33,9 et 33,0 MJ.L⁻¹). Si la fraction volumique de suie peut être réduite par l'ajout de la fonction cétone, on peut également s'attendre à un impact sur la nanostructure des suies (teneur en groupes aliphatiques impactant la cristallinité, la tortuosité et le diamètre de particules primaires) et donc la réactivité à l'oxydation des suies formées [30].

1.1.2 Carburants polycycliques

Les recherches bibliographiques montrent fort peu d'études sur la combustion et la pyrolyse des hydrocarbures polycycliques. Dans ce qui suit, une discussion générale sera abordée sur le norbornane et ses dérivés, l'exo-tétrahydrodicyclopentadiène, sous le nom commercial JP-10, et enfin un isomère de la fenchone, le camphre.

Chapitre 1 : Bibliographie

1.1.2.1 Norbornane C_7H_{12}

C'est un composé polycyclique ayant une densité énergétique de $0,854 \text{ g.cm}^{-3}$, connu pour ses liaisons et angles tendus, le cycle étant contraint dans une configuration « bateau », ce qui donne lieu à une réactivité élevée[31].

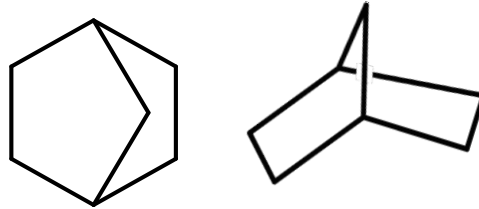


Figure 1.4 : Structure du norbornane (bicyclo [2-2-1] heptane) (à gauche) C_7H_{12} et la configuration bateau (à droite).

Récemment, Abdrabou et al.[32] ont montré que l'ajout de norbornane à un carburant diesel entraîne une réduction de l'indice de suie et une augmentation du désordre de la suie, en raison de l'incorporation d'un cycle à cinq carbones dans la structure moléculaire de la suie [33]-[34]. Une étude a été menée par Sirjean et al.[35] sur la pyrolyse du norbornane dissous dans le benzène (un mélange qui contient 20 % de norbornane et 80% de benzène) en réacteur parfaitement agité par jet gazeux ; à des températures comprises entre 873 K – 973 K et à pression atmosphérique avec un temps de passage $\tau = 1$ à 4 s, en milieu très dilué.

Les principaux produits observés étaient l'hydrogène, l'éthylène et le 1,3 cyclopentadiène.

Ils ont décrit qualitativement les voies de pyrolyse possibles qui ont été prises en compte dans leur mécanisme, notamment les réactions de dissociation unimoléculaire du norbornane, les réactions de décomposition des biradicaux ainsi que les réactions par β -scission des radicaux norbornyles. Par la suite, un modèle cinétique complet de la pyrolyse du norbornane a été développé et validé par Herbinet et al.[36] afin de reproduire les résultats expérimentaux obtenus.

Les trois radicaux norbornyles formés à partir de métathèse présentent les principales voies de consommation du norbornane.

Chapitre 1 : Bibliographie

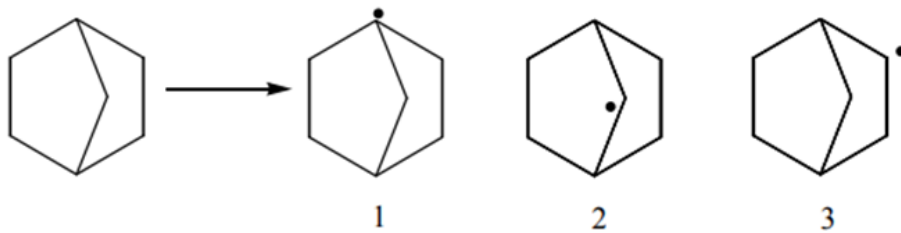


Figure 1.5 : Radicaux norbornyles obtenus par métathèse.

Le 3-norbornyle produit trois radicaux possibles par β -scission, le schéma réactionnel suivant présente les voies de décomposition de ce radical

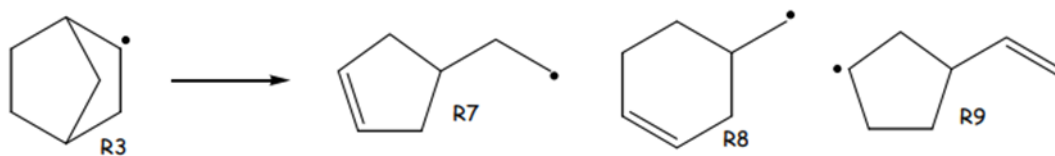


Figure 1.6 : Radicaux produits par β -scission.

Les analyses de sensibilité ont montré que les réactions de décomposition de R7 par β -scission, isomérisation et par métathèse jouaient un rôle important sur la consommation du norbornane mais aussi la formation du 1,3-cyclopentadiène qui est un des trois produits principaux détecté expérimentalement avec l'hydrogène et l'éthylène.

1.1.2.2 Ethylnorbornane

Dérivé du norbornane, carburant potentiel à haute densité énergétique, il présente une grande réactivité et de meilleures propriétés physiques que le norbornane notamment : une densité de $0,86 \text{ g.cm}^{-3}$ à 298 K et un PCI de $42,8 \text{ MJ.kg}^{-1}$ [37].

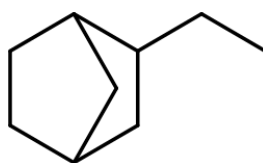


Figure 1.7 : Structure du 2-ethylbicyclo [2.2.1] heptane.

Chapitre 1 : Bibliographie

En raison de ses caractéristiques physiques l'éthylnorbornane sera utilisé comme composant intéressant des carburants hydrocarbonés à haute densité ou additif de carburants pour les moteurs de fusée [38]. Récemment, Wang et al.[39] ont réalisé une étude sur la pyrolyse d'un mélange de stéréoisomères : exo- éthylnorbornane (28,4 mol %) et endo- éthylnorbornane (71,5 mol %) dans un microréacteur à écoulement à $773\text{ K} \leq T \leq 1098\text{ K}$, et une pression de 0,1-3 MPa avec un temps de séjour 2,1-10,3 s pour explorer son mécanisme de pyrolyse à haute pression. Au total, 30 produits de pyrolyse sont détectés et quantifiés en utilisant la GC-MS/FID, dont les principaux produits sont l'éthylène, le méthane, le 1,3-cyclopentadiène et le benzène. L'analyse cinétique montre qu'aucune isomérisation de l'exo-éthylnorbornane et de l'endo-éthylnorbornane n'est observée et que les énergies d'activation de la pyrolyse globale de l'éthylnorbornane augmentent légèrement de 0,1 MPa à 3 MPa, indiquant l'effet défavorable de la pression. Un calcul théorique détaillé de la pyrolyse initiale de ce carburant est effectué pour expliquer la formation et la sélectivité des produits primaires sous différentes pressions, ce qui inclut des ruptures des liaisons C-C et des réactions d'arrachement de l'hydrogène conduisant aux diradicaux et des radicaux qui subissent une décomposition supplémentaire via une β -scission (C-C).

On peut trouver également d'autres carburants ayant une structure semblable à celle du norbornane avec une double liaison supplémentaire tel que le norbornène, C_7H_{12} (bicyclo[2-2-1] hept-2-ène), et le norbornadiène, C_7H_8 (bicyclo[2-2-1]hept-2,5-diène).

Balcyoolu et al. [40] ont effectué la pyrolyse du norbornène à 563 K-618 K et 0,1 MPa menée dans un système couplé GC-réacteur pour les mesures à haute température, et ont calculé les paramètres d'Arrhenius des réactions rétro-Diels-Alder pour produire du 1,3-cyclopentadiène et de l'éthylène, ce qui correspondait assez bien aux valeurs de la littérature.

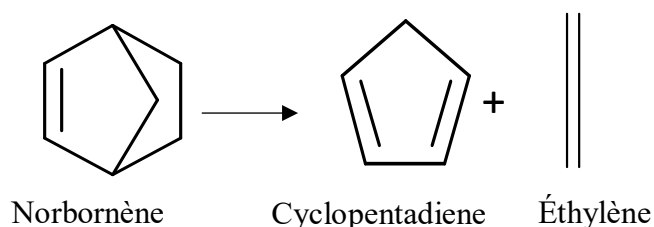


Figure 1. 8:Pyrolyse du bicyclo[2-2-1]hept-2-ène(Norbornène).

Chapitre 1 : Bibliographie

De même Woods et al. [41] et Birely et al. [42] ont également étudié la pyrolyse du norbornadiène et ont trouvé que les voies de pyrolyse du norbornadiène contenaient trois réactions : la réaction rétro-Diels-Alder pour produire du 1,3-cyclopentadiène et de l'acétylène, des réactions d'isomérisation en 1,3,5-cycloheptatriène et en toluène. Enfin, une isomérisation du norbornadiène en quadricyclane a été identifiée par Wang et al. [43].

1.1.2.3 Exo-tétrahydrodicyclopentadiène (JP-10)

C'est un alcane tricyclique qui fait partie des carburants de synthèse qui sont utilisés en aéronautique. Sa densité est de $0,94 \text{ g.mL}^{-1}$ et son pouvoir calorifique de $39,6 \text{ MJ.L}^{-1}$.

Ses propriétés thermiques, notamment le point de congélation, la densité d'énergie volumétrique et l'impulsion spécifique élevés en font l'un des carburants de missile les plus prometteurs [44].

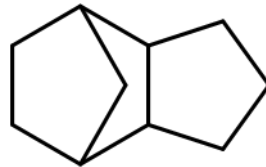


Figure 1.9 : Structure de l'exo-tétrahydrodicyclopentadiène.

Des études concernant l'auto-inflammation du JP-10 [44] ont été menées en tube à choc afin de mesurer les délais d'auto-inflammation des mélanges JP-10/O₂/Ar dans les conditions opératoires de températures comprises entre 1100 K et 1700 K avec une pression comprise entre 10⁵ et 10⁶ kPa des richesses de 0,5 à 2. Les résultats obtenus par Colket et Spadaccini [45] ont montré que les délais d'auto-inflammation du JP-10 étaient plus courts que ceux du méthane, équivalent à ceux du n-heptane et plus longs que ceux de l'éthylène et de l'hydrogène.

La modélisation a été réalisée par Davidson et al.[46]. Leur modèle reproduit d'une manière satisfaisante les délais d'auto-inflammation à haute pression.

Davidson et al. [47] ont également réalisé des travaux sur la décomposition thermique du JP-10 notamment des expériences ont été menées dans un tube à onde de choc et une méthode de caractérisation des produits a été développée. Le benzène, cyclopentène, propène, éthylène, acétylène, 1,3 butadiène, cyclopentadiène et JP-10 ont été identifiés par spectroscopie

Chapitre 1 : Bibliographie

d'absorption UV. Cette méthode de caractérisation leur a permis de comparer le spectre d'absorption UV obtenus expérimentalement avec les spectres des espèces cités avant.

1.1.2.4 Les pinènes et le camphène

Capouet et al. [48] ont identifié quelques produits d'oxydation atmosphérique du pinène, parmi lesquels le norpinonaldehyde, l'hydroxymenone. Vereecken et Peteers [49] ont de plus identifié la nopinone, la pinocarvone et le myrtenal comme intermédiaires. L'aldéhyde campholénique semble également un intermédiaire important dans l'oxydation du pinène[50]. La cinétique d'addition de OH sur le camphène a été déterminée en se basant sur des calculs de structure électronique [51], menant à la production de la camphélinone [52].

1.1.2.5 Camphre

Monoterpène cyclique, c'est un isomère de la fenchone, il possède deux atomes de carbone asymétriques et, en raison de sa chiralité, existe sous la forme de deux stéréoisomères (-) - camphre et (+) - camphre.

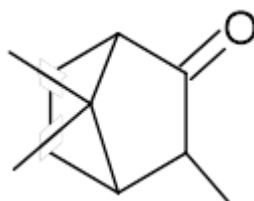


Figure 1.10 : Structure du camphre $C_{10}H_{16}O$.

Ce terpène peut être considéré comme une alternative biosourcée aux hydrocarbures fossiles. Des études ont montré l'intérêt de cet additif : Morajkar et al.[30] ont réalisé une étude pour voir l'effet d'ajout de l'huile de camphre au diesel sur les nanostructures et la réactivité oxydante de la suie générée par la combustion. L'huile de camphre, présente une viscosité de $(1,9 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ à 40 °C et un faible indice de cétane (inférieur à 10) (LVLC), en faisant un additif alternatif prometteur pour les carburants automobiles. Cependant, sa propension à la suie et ses effets ultérieurs sur la nanostructure de la suie, lorsqu'elle est mélangée au diesel ne sont pas encore bien appréhendés. Durant leur travail, les effets de l'addition de camphre et d'huile de camphre au diesel sur la propension à la suie avec la morphologie des particules de suie sont

Chapitre 1 : Bibliographie

étudiés dans une flamme de diffusion. Ils ont constaté que pour 5 % de camphre et 10% de l'huile de camphre, le mélange donne une suie dont le diamètre des particules est plus petit mais qui augmente le degré de désordre cristallin et les quantités de fonctionnalités de l'oxygène et d'aliphatiques dans la suie. Cette étude démontre avec succès le potentiel des composés cétoniques terpénoïdes avec une structure cyclique bicyclique caractéristique de l'amélioration de la réactivité oxydative des suies dérivées de la combustion, comme souhaité dans les technologies de filtres à particules.

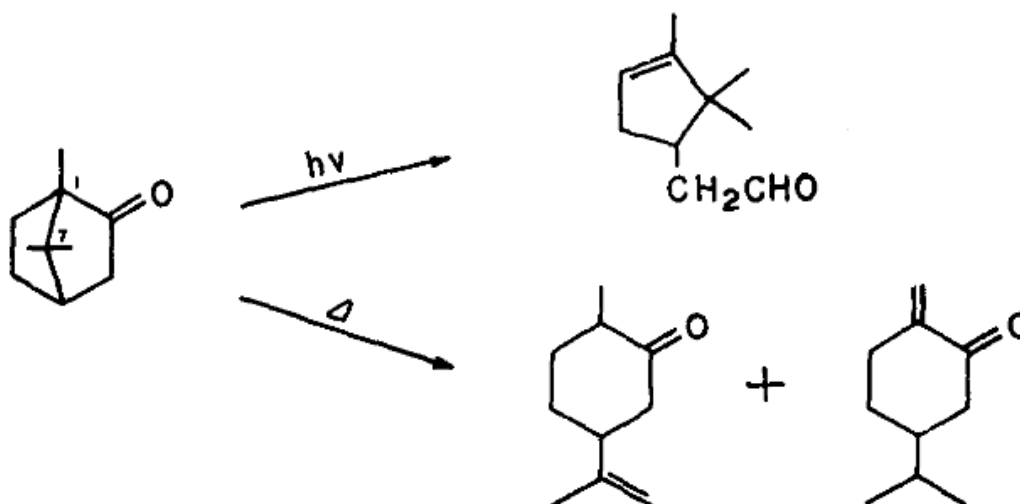


Figure 1. 11 : Voies photochimiques et thermiques de décomposition du camphre identifiées par Sato et Obase [53]

La combustion du camphre conduit à la formation de suies hautement graphitisées [54] qui indique la présence des aromatiques péri-condensés, ce qui implique l'existence de cycles intermédiaires à cinq chaînons dans les précurseurs de suie, et la production des HAP (hydrocarbures aromatiques polycycliques). Bien que la fonction cétone ait un effet bénéfique sur les HAP et la suie [55], son impact combiné avec le cycle tendu sur la production de HAP et la chimie de l'oxydation reste à déterminer.

Chapitre 1 : Bibliographie

1.2 Impact de la tension de cycle et des substituants (carbonyle, méthyle)

Le concept de tension de cycle, formulé par Baeyer vers 1890 [56], correspond à une déstabilisation résultant d'une combinaison d'une contrainte d'angle d'une molécule cyclique (de l'ordre de 10 kcal.mol⁻¹), de torsion (tension de Pitzer, de l'ordre de 5 kcal.mol⁻¹) ou transannulaire (contrainte de van der Waals-Prelog, de l'ordre de 1 kcal.mol⁻¹).

L'énergie de tension de cycle peut impacter directement l'énergie d'activation de réactions de (retro)cycloaddition [57] et modifier l'importance relative des voies d'ouvertures de cycle ou de réactions sigmatropiques définies par un réarrangement intramoléculaire qui transforme une liaison sigma en une autre liaison sigma [58] vis-à-vis des fonctionnalisations sur le cycle carboné (les arrachements d'hydrogène, addition O₂).

Contrairement aux aliphatiques qui produisent deux monoradicaux, l'ouverture du cycle par scission C-C forme des biradicaux [59] qui sont convertis par dismutation interne ou décomposition par β -scission [36]. Les dicycloalcènes résultant d'arrachement d'hydrogène sur le squelette carboné peuvent également subir une réaction de retro-Diels-Alder qui produit des alcènes pouvant ensuite contribuer à la formation des précurseurs de suies. Or, Zewail [60] a montré expérimentalement la complexité mécanistique de cette réaction: la scission C-C en tête de pont du norbornène faisant intervenir une rotation du biradical qui se décompose en cyclopentadiène selon deux mécanismes possibles. La présence d'une gêne stérique (via des groupements méthyles) est susceptible de perturber cette réaction.

L'effet d'un groupement alkyle sur le carbone ponté du norbornane ne semble pas impacter l'énergie de tension à cycles tendus, l'effet étant plus sensible dans le système π du norbornène [61]. L'introduction de groupements méthyles au norbornane induit une distorsion supplémentaire, impactant la liaison C _{α} -C _{β} [62]. L'ajout de groupes méthyle sur des cycles tendus semble diminuer la stabilité thermodynamique tout en diminuant la réactivité dans les conditions atmosphériques [63].

L'effet de la fonction cétone sur les vitesses d'abstraction en α du carbonyle est établi pour des composés aliphatiques [64] mais l'effet sur des bicycliques n'est pas bien caractérisé. Bien que la présence d'une fonction cétone sur un hydrocarbure permette généralement de diminuer sa propension à former des composés aromatiques [65], l'effet combiné de la tension de cycle et du groupe carbonyle sur l'importance des voies biradicalaires et monoradicalaires ainsi que sur la sélectivité des produits de combustion reste indéterminé.

Chapitre 1 : Bibliographie

1.3 Conclusion

Ce chapitre visait à identifier les particularités thermocinétiques des hydrocarbures polycycliques disponibles dans la littérature. La revue bibliographique indique que peu d'études ont été rapportées sur la combustion des terpènes polycycliques. Dans le cadre de notre étude des expériences seront menées pour combler le peu d'informations concernant la combustion des carburants à haute densité énergétique. A la fin de ce chapitre ressort un ensemble d'informations des tensions de cycle et des substituants (la fonction cétone et le méthyle), afin de comprendre leur impact sur la réactivité des hydrocarbures polycycliques.

Dans le cadre de notre travail, la fenchone est le carburant choisi en raison de son pouvoir calorifique élevé ainsi que son indice d'octane (RON) de l'ordre de 93, propice à une utilisation en allumage commandé. Une étude expérimentale et numérique basée sur l'oxydation de ce composé en réacteur parfaitement agité et des mesures de délais l'auto-inflammation en machine à compression rapide s'avère donc utile pour la communauté des cinéticiens et des motoristes. Ce travail représente donc la première étude expérimentale et numérique de la cinétique d'oxydation de la fenchone.

Chapitre 1 : Bibliographie

Référence du chapitre 1

- [21] G. Kasiraman, B. Nagalingam, et M. Balakrishnan, « Performance, emission and combustion improvements in a direct injection diesel engine using cashew nut shell oil as fuel with camphor oil blending », *Energy*, vol. 47, n° 1, p. 116-124, nov. 2012, doi: 10.1016/j.energy.2012.09.022.
- [22] A. M. Schweidtmann, J. G. Rittig, A. König, M. Grohe, A. Mitsos, et M. Dahmen, « Graph Neural Networks for Prediction of Fuel Ignition Quality », *Energy Fuels*, vol. 34, n° 9, p. 11395-11407, sept. 2020, doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c01533.
- [23] D. R. Stull, « Vapor Pressure of Pure Substances. Organic and Inorganic Compounds », *Ind. Eng. Chem.*, vol. 39, n° 4, p. 517-540, avr. 1947, doi: 10.1021/ie50448a022.
- [24] « <https://www.anses.fr/fr/system/files/AAAT2009sa0262.pdf> ». Consulté le: 5 mars 2023. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.anses.fr/fr/system/files/AAAT2009sa0262.pdf>
- [25] B. Coudour *et al.*, « Combustion Characteristics of Two Biogenic Volatile Organic Compounds: L-Fenchone and 3-Hexen-1-OL », *Combustion Science and Technology*, vol. 186, n° 10-11, p. 1284-1294, nov. 2014, doi: 10.1080/00102202.2014.934568.
- [26] F. Parsinejad, C. Arcari, et H. Metghalchi*, « FLAME STRUCTURE AND BURNING SPEED OF JP-10 AIR MIXTURES », *Combustion Science and Technology*, vol. 178, n° 5, p. 975-1000, avr. 2006, doi: 10.1080/00102200500270080.
- [27] L. Courty, K. Chetehouna, F. Halter, F. Foucher, J. P. Garo, et C. Mounaïm-Rousselle, « Experimental determination of emission and laminar burning speeds of α -pinene », *Combustion and Flame*, vol. 159, n° 4, p. 1385-1392, avr. 2012, doi: 10.1016/j.combustflame.2011.11.003.
- [28] A. M. Schweidtmann, J. G. Rittig, A. König, M. Grohe, A. Mitsos, et M. Dahmen, « Graph Neural Networks for Prediction of Fuel Ignition Quality », *Energy Fuels*, vol. 34, n° 9, p. 11395-11407, sept. 2020, doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c01533.
- [29] J. H. Badia, E. Ramírez, R. Bringué, F. Cunill, et J. Delgado, « New Octane Booster Molecules for Modern Gasoline Composition », *Energy Fuels*, vol. 35, n° 14, p. 10949-10997, juill. 2021, doi: 10.1021/acs.energyfuels.1c00912.
- [30] P. P. Morajkar *et al.*, « Effects of Camphor Oil Addition to Diesel on the Nanostructures and Oxidative Reactivity of Combustion-Generated Soot », *Energy Fuels*, vol. 33, n° 12, p. 12852-12864, déc. 2019, doi: 10.1021/acs.energyfuels.9b03390.

Chapitre 1 : Bibliographie

- [31] S. Ghosh et S. Banerjee, « Carbon-carbon bond cleavage in norbornane derivatives. Convenient route to novel carbocyclic rings », *Arkivoc*, vol. 2002, n° 7, p. 8-20, mai 2002, doi: 10.3998/ark.5550190.0003.702.
- [32] M. K. Abdrabou, P. P. Morajkar, G. D. J. Guerrero Peña, A. Raj, M. Elkadi, et A. V. Salkar, « Effect of 5-membered bicyclic hydrocarbon additives on nanostructural disorder and oxidative reactivity of diffusion flame-generated diesel soot », *Fuel*, vol. 275, p. 117918, sept. 2020, doi: 10.1016/j.fuel.2020.117918.
- [33] M. Salamanca, M. L. Botero, J. W. Martin, J. A. H. Dreyer, J. Akroyd, et M. Kraft, « The impact of cyclic fuels on the formation and structure of soot », *Combustion and Flame*, vol. 219, p. 1-12, sept. 2020, doi: 10.1016/j.combustflame.2020.04.026.
- [34] R. J. Andrews, C. F. Smith, et A. J. Alexander, « Mechanism of carbon nanotube growth from camphor and camphor analogs by chemical vapor deposition », *Carbon*, vol. 44, n° 2, p. 341-347, févr. 2006, doi: 10.1016/j.carbon.2005.07.025.
- [35] B. Sirjean, O. Herbinet, P. A. Glaude, M. F. Ruiz-Lopez, et R. Fournet, « Theoretical Study of the Thermal Decomposition of a Jet Fuel Surrogate », *Kinetics*, mars 2007, doi: 10.48550/arXiv.0904.3538.
- [36] O. Herbinet, B. Sirjean, F. Battin-Leclerc, R. Fournet, et P.-M. Marquaire, « Thermal Decomposition of Norbornane (bicyclo[2.2.1]heptane) Dissolved in Benzene: Experimental Study and Mechanism Investigation », *Energy Fuels*, vol. 21, n° 3, p. 1406-1414, mai 2007, doi: 10.1021/ef0606411.
- [37] J. Xiao, J. Zhang, L. Pan, C. Shi, X. Zhang, et J.-J. Zou, « Photocatalytic Synthesis of High-Energy-Density Fuel: Catalysts, Mechanisms, and Challenges », *Trans. Tianjin Univ.*, vol. 27, n° 4, p. 280-294, août 2021, doi: 10.1007/s12209-021-00290-y.
- [38] M. V. Savos'kin *et al.*, « New approaches to the development of high-performance hydrocarbon propellants », *Russ J Appl Chem*, vol. 80, n° 1, p. 31-37, janv. 2007, doi: 10.1134/S1070427207010065.
- [39] H. Wang *et al.*, « Experimental and theoretical study on 2-ethylnorbornane pyrolysis under atmospheric and high pressure », *Fuel*, vol. 272, p. 117724, juill. 2020, doi: 10.1016/j.fuel.2020.117724.
- [40] N. Balcýoolu et V. Güner, « A High Temperature Kinetic Measurement with a Coupled Reactor-Gc System », *Instrumentation Science & Technology*, vol. 29, n° 3, p. 193-200, juin 2001, doi: 10.1081/CI-100103466.
- [41] W. Woods, « Mechanism of the Thermal Isomerization of Bicyclo[2,2,1]heptadiene », *J. Org. Chem.*, vol. 23, n° 1, p. 110-112, janv. 1958, doi: 10.1021/jo01095a617.

Chapitre 1 : Bibliographie

- [42] J. H. Birely et J. P. Chesick, « THE KINETICS OF THE THERMAL DECOMPOSITION OF [2,2,1]BICYCLOHEPTADIENE », *J. Phys. Chem.*, vol. 66, n° 3, p. 568-570, mars 1962, doi: 10.1021/j100809a515.
- [43] H. Wang, S. Gong, L. Wang, X. Zhang, et G. Liu, « High pressure pyrolysis mechanism and kinetics of a strained-caged hydrocarbon fuel quadricyclane », *Fuel*, vol. 239, p. 935-945, mars 2019, doi: 10.1016/j.fuel.2018.11.084.
- [44] T. J. Bruno, M. L. Huber, A. Laesecke, E. W. Lemmon, et R. A. Perkins, « Thermochemical and thermophysical properties of JP-10 », National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, NIST IR 6640, 2006. doi: 10.6028/NIST.IR.6640.
- [45] M. B. Colket et L. J. Spadaccini, « Scramjet Fuels Autoignition Study », *Journal of Propulsion and Power*, vol. 17, n° 2, p. 315-323, mars 2001, doi: 10.2514/2.5744.
- [46] D. F. Davidson, D. C. Horning, J. T. Herbon, et R. K. Hanson, « Shock tube measurements of JP-10 ignition », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, n° 2, p. 1687-1692, janv. 2000, doi: 10.1016/S0082-0784(00)80568-8.
- [47] D. Davidson, D. Horning, M. Oehlschlaeger, et R. Hanson, « The decomposition products of JP-10 », in *37th Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Salt Lake City, UT, U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics, juill. 2001. doi: 10.2514/6.2001-3707.
- [48] M. Capouet, J. Peeters, B. Nozière, et J.-F. Müller, « Alpha-pinene oxidation by OH: simulations of laboratory experiments », *Atmospheric Chemistry and Physics*, vol. 4, n° 9/10, p. 2285-2311, nov. 2004, doi: 10.5194/acp-4-2285-2004.
- [49] L. Vereecken et J. Peeters, « A theoretical study of the OH-initiated gas-phase oxidation mechanism of β -pinene (C₁₀H₁₆): first generation products », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 14, n° 11, p. 3802, 2012, doi: 10.1039/c2cp23711c.
- [50] W. C. Thomas, W. D. Dresser, D. A. Cortés, et M. J. Elrod, « Gas Phase Oxidation of Campholenic Aldehyde and Solution Phase Reactivity of its Epoxide Derivative », *J. Phys. Chem. A*, vol. 121, n° 1, p. 168-180, janv. 2017, doi: 10.1021/acs.jpca.6b08642.
- [51] S. D. Baruah, N. K. Gour, P. J. Sarma, et R. C. Deka, « OH-initiated mechanistic pathways and kinetics of camphene and fate of product radical: a DFT approach », *Environ Sci Pollut Res*, vol. 25, n° 3, p. 2147-2156, janv. 2018, doi: 10.1007/s11356-017-0646-2.
- [52] M. Subramani *et al.*, « Kinetics and degradation of camphene with OH radicals and its subsequent fate under the atmospheric O₂ and NO radicals - A theoretical study », *Chemosphere*, vol. 267, p. 129250, mars 2021, doi: 10.1016/j.chemosphere.2020.129250.

Chapitre 1 : Bibliographie

- [53] T. Sato et H. Obase, « Pyrolysis and photolysis of camphor oxime », *Tetrahedron Letters*, vol. 8, n° 17, p. 1633-1636, janv. 1967, doi: 10.1016/S0040-4039(00)70328-5.
- [54] M. Balachandran, « Synthesis and characterization of porous, mixed phase, wrinkled, few layer graphene like nanocarbon from charcoal », *Russian Journal of Physical Chemistry A*, vol. 89, p. 2438-2442, déc. 2015, doi: 10.1134/S0036024415130257.
- [55] Z. Hong, D. F. Davidson, S. S. Vasu, et R. K. Hanson, « The effect of oxygenates on soot formation in rich heptane mixtures: A shock tube study », *Fuel*, vol. 88, n° 10, p. 1901-1906, oct. 2009, doi: 10.1016/j.fuel.2009.04.013.
- [56] K. B. Wiberg, « The Concept of Strain in Organic Chemistry », *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, vol. 25, n° 4, p. 312-322, avr. 1986, doi: 10.1002/anie.198603121.
- [57] B. J. Levandowski, T. A. Hamlin, F. M. Bickelhaupt, et K. N. Houk, « Role of Orbital Interactions and Activation Strain (Distortion Energies) on Reactivities in the Normal and Inverse Electron-Demand Cycloadditions of Strained and Unstrained Cycloalkenes », *J. Org. Chem.*, vol. 82, n° 16, p. 8668-8675, août 2017, doi: 10.1021/acs.joc.7b01673.
- [58] L. Birladeanu, « The Story of the Wagner-Meerwein Rearrangement », *J. Chem. Educ.*, vol. 77, n° 7, p. 858, juill. 2000, doi: 10.1021/ed077p858.
- [59] H. E. O'Neal et S. W. Benson, « A thermochemical and kinetic analysis of the mechanisms of pyrolysis of polycyclic molecules », *Int. J. Chem. Kinet.*, vol. 2, n° 6, p. 423-456, nov. 1970, doi: 10.1002/kin.550020602.
- [60] B. A. Horn, J. L. Herek, et A. H. Zewail, « Retro-Diels–Alder Femtosecond Reaction Dynamics », *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 118, n° 36, p. 8755-8756, janv. 1996, doi: 10.1021/ja9620696.
- [61] P. R. Khoury, J. D. Goddard, et W. Tam, « Ring strain energies: substituted rings, norbornanes, norbornenes and norbornadienes », *Tetrahedron*, vol. 60, n° 37, p. 8103-8112, sept. 2004, doi: 10.1016/j.tet.2004.06.100.
- [62] J. D. Yoneda, P. R. Seidl, K. Z. Leal, M. G. Campos, et R. Rittner, « A theoretical investigation of steric effects on ¹H chemical shifts of camphor and norcamphor derivatives », *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, vol. 767, n° 1-3, p. 29-36, août 2006, doi: 10.1016/j.theochem.2006.04.036.
- [63] K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, et M. M. Maslov, « Influence of methyl functional groups on the stability of cubane carbon cage », *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 81, p. 1-6, juill. 2016, doi: 10.1016/j.physe.2016.02.010.
- [64] C.-W. Zhou, J. M. Simmie, et H. J. Curran, « Ab initio and kinetic study of the reaction of ketones with OH for T = 500–2000 K. Part I: hydrogen-abstraction from H₃CC(O)CH₃–

Chapitre 1 : Bibliographie

$x(\text{CH}_3)_x$, $x = 0 \mapsto 2$ », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 13, n° 23, p. 11175, 2011, doi: 10.1039/c0cp02754e.

- [65] S. Thion, C. Togbé, G. Dayma, Z. Serinyel, et P. Dagaut, « Experimental and Detailed Kinetic Modeling Study of Cyclopentanone Oxidation in a Jet-Stirred Reactor at 1 and 10 atm », *Energy Fuels*, vol. 31, n° 3, p. 2144-2155, mars 2017, doi: 10.1021/acs.energyfuels.6b02061.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

| | |
|---|-----------|
| Chapitre 2 : dispositifs expérimentaux | 28 |
| 2.1 Le réacteur parfaitement agité par jets gazeux | 29 |
| 2.1.1 Description du réacteur utilisé | 29 |
| 2.1.2 Principe | 30 |
| 2.1.3 Calcul du débit des réactifs | 31 |
| 2.1.4 Introduction des réactifs | 32 |
| 2.1.5 Prélèvement | 32 |
| 2.1.6 Description des dispositifs d'analyse | 33 |
| 2.1.7 La spectrométrie à Infrarouge à Transformée de Fourier | 33 |
| 2.1.8 La chromatographie en phase gazeuse | 34 |
| 2.1.9 Comparaison des résultats en utilisant les différentes méthodes | 36 |
| 2.1.10 Evaluation des incertitudes | 36 |
| 2.2 Machine à Compression Rapide | 37 |
| 2.2.1 Description et principe du montage expérimental | 37 |
| 2.2.2 Introduction des réactifs | 39 |
| 2.2.3 Acquisition des données | 39 |
| Références du chapitre 2 | 41 |

Chapitre 2 : dispositifs expérimentaux

Ce chapitre décrit les dispositifs expérimentaux utilisés dans le cadre de ce travail.

La première partie présente le réacteur parfaitement agité par jets gazeux adapté aux études cinétiques en phase gazeuse, qui permet de déterminer les voies réactionnelles mises en jeu lors de l'oxydation de la fenchone à 10 bars sur un large domaine de température (500 – 1200 K). Les dispositifs analytiques sont également présentés, permettant d'identifier et de quantifier les intermédiaires d'oxydation. La deuxième partie est consacrée à la description de la machine à compression rapide qui permet de mesurer des délais d'auto-inflammation.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

2.1 Le réacteur parfaitement agité par jets gazeux

2.1.1 Description du réacteur utilisé

Le réacteur auto-agité par jets gazeux fonctionne en régime continu avec la particularité d'être homogène en température et en concentration à l'échelle macroscopique[66]. Dans ces conditions idéales, la vitesse de conversion des réactifs en produits est contrôlée uniquement par les processus chimiques, et la concentration à la sortie du réacteur est la même à la concentration au sein du réacteur.

Le réacteur est caractérisé par un volume fixe V , un temps de séjour moyen τ , une température T , une pression P et des fractions molaires des espèces X_k .

Le présent dispositif a été mis en place par Dagaut et al. [67]. Il s'agit d'une sphère d'environ 42 cm^3 en silice fondue, dans laquelle sont positionnés quatre injecteurs opposés et disposés de façon pyramidale. Grâce à cette disposition, l'insertion et le déplacement d'une sonde de prélèvement ainsi que d'un thermocouple dans le réacteur sont possibles tout en gardant le mélange réactionnel macroscopiquement homogène dans tout le volume. Deux résistances chauffantes autour du réacteur permettent au mélange réactif d'atteindre la température souhaitée durant chaque expérience. La température maximale que le réacteur peut atteindre dépend du temps de séjour et de la pression, elle est d'environ 1300 K. Afin de minimiser les pertes de chaleur, une couche en laine de céramique est maintenue autour de l'ensemble.

Le tout est placé dans une enceinte métallique pour pouvoir maintenir une pressurisation pouvant aller jusqu'à 10 atm. L'ensemble est représenté à *la figure 2.1*.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

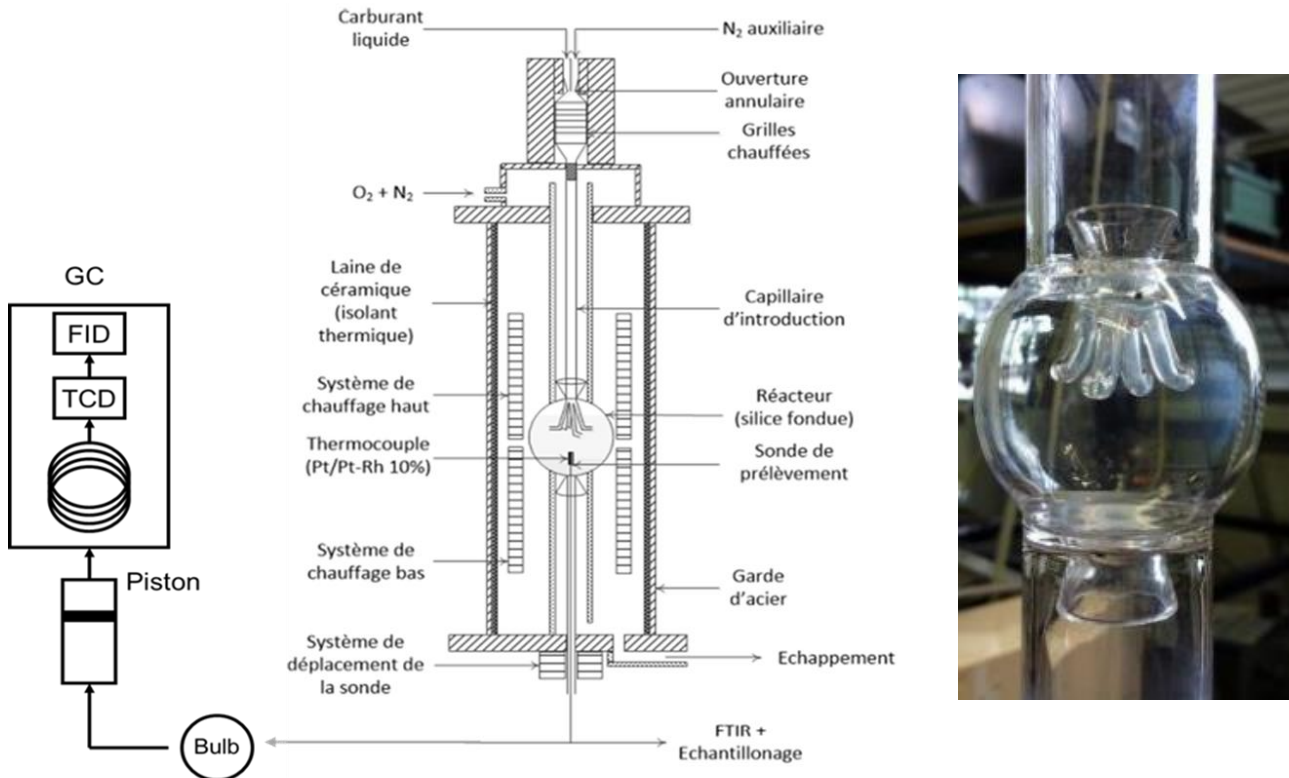


Figure 2. 1: Réacteur auto agité utilisé dans le cadre de ce travail.

2.1.2 Principe

Le principe du réacteur auto agité a été décrit par Matras et Villermaux [68]. Dans le cadre de ce travail, nous avons fait varier la température en gardant le temps de séjour constant, la pression et la fraction molaire des réactifs en entrée ainsi les expériences ont été réalisées avec les mêmes débitmètres.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

2.1.3 Calcul du débit des réactifs

En changeant les températures, il est nécessaire de recalculer les débits. En effet le temps de passage est lié au débit total, au volume du réacteur, à la pression et à la température. Si l'on néglige l'effet de l'expansion chimique sur le temps de séjour (dilution importante) :

$$\tau = \frac{V_r T_0 P}{Q_e T P_0}$$

Avec :

- τ Temps de passage en s
- V_r Volume du réacteur en m^3
- Q_e Débit volumique total entrant dans le réacteur $m^3 \cdot s^{-1}$
- T_0 Température ambiante en K
- P_0 Pression ambiante en atm
- P Pression au sein du réacteur en atm
- T Température du réacteur.

Dans le cas d'un composé gazeux, on introduit une fraction molaire X_i afin d'obtenir le débit de ce composé via la loi de Dalton :

$$Q_{e,i} = X_{i,e} * Q_e = X_{i,e} \frac{V_r T_0 P}{\tau T P_0}$$

Dans le cas d'un composé liquide vaporisé sous forme d'un gaz parfait :

$$P_0 V_r = \frac{m R T_0}{M} \Rightarrow \frac{T_0}{P_0} = \frac{V_r M}{m R} = \frac{M}{\rho R}$$

Où :

ce qui fournit le débit liquide correspondant :

- m Masse de ce composé en kg.
- M Masse molaire du composé en $kg \cdot mol^{-1}$
- R Constante des gaz parfaits $8.314 J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$
- ρ Masse volumique du composé liquide en $kg \cdot m^{-3}$

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

$$Q_{liquide} = X_{liquide} \frac{V_r}{\tau} \frac{P}{T} \frac{M}{\rho R}$$

2.1.4 Introduction des réactifs

Une pompe HPLC est utilisée pour acheminer la fenchone au débit souhaité. Le carburant est ensuite poussé à travers le vaporisateur ($T_{\text{vapo}} = 200 \text{ }^\circ \text{C}$) par un débit d'azote (N_2), qualifié d'auxiliaire. Le carburant, transformé en phase gazeuse, passe par un capillaire d'introduction jusqu'à l'entrée du réacteur. Un second circuit permet l'introduction du mélange oxydant (oxygène et azote primaire O_2/N_2). Afin d'empêcher toute réaction prématurée, le contact entre les deux réactifs est ainsi évité avant le mélange. Les débits gazeux, d'azote primaire, auxiliaire, et d'oxygène, sont contrôlés par des débitmètres massiques calibrés régulièrement.

2.1.5 Prélèvement

Des prélèvements sont réalisés afin de quantifier précisément les fractions molaires des différents réactifs, intermédiaires et produits d'oxydation formés dans le réacteur.

Pour cela, on utilise une sonde sonique basse pression qui est directement introduite dans le réacteur, par l'évacuation. Cette sonde est couplée à un thermocouple Pt/Pt-Rh 10 inséré dans une gaine de quartz afin d'éviter toute réaction catalytique, ils peuvent être déplacés suivant l'axe vertical du réacteur pour s'assurer de l'homogénéité du mélange en température et concentration. Le passage rapide de l'échantillon à basse pression fige les réactions chimiques et permet de limiter les évolutions du mélange lors du transfert vers les systèmes analytiques. Pour éviter toute condensation, l'acheminement des gaz est réalisé par le biais d'une ligne chauffée à 160°C . Les échantillons sont ensuite analysés en ligne par Spectrométrie Infrarouge à Transformée de Fourier (FTIR) et par chromatographie en phase gazeuse (CPG).

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

2.1.6 Description des dispositifs d'analyse

Dans le cadre de ce travail, la Spectrométrie Infrarouge à Transformée de Fourier (FTIR) ainsi que la chromatographie en phase gazeuse CPG couplée à trois détecteurs différents (spectromètre de masse (MS), à ionisation de flamme (FID) et conductivité thermique (TCD)) ont été utilisés.

2.1.7 La spectrométrie à Infrarouge à Transformée de Fourier

Avant d'entamer la quantification, une calibration est nécessaire, l'acquisition de plusieurs spectres d'absorption est réalisée à différentes concentrations puis on obtient une courbe d'étalonnage qui permet de lier la concentration à l'absorption lumineuse.

Durant ce travail, un spectromètre infrarouge à Transformée de Fourier Thermo Nexus 670 a été utilisé. La longueur du trajet optique de la cellule de mesure est de 10 mètres et 32 scans sont réalisés par mesure avec une résolution spectrale de 0.5 cm^{-1} , $T_{\text{cellule}} = 145 \text{ }^\circ \text{C}$, $P = 200 \text{ mbar}$.

Le spectre obtenu en fin de mesure (focalisation d'une figure d'interférence sur l'échantillon gazeux) correspond à une moyenne de ces 32 scans. La quantification des produits de fin de combustion (CO, CO₂, H₂O et formaldéhyde, CH₂O) et des hydrocarbures non oxygénés allant jusqu'au C₃ a pu être réalisée en utilisant la loi de Beer-Lambert. Chaque groupement présent dans la structure du carburant étudié possède une signature spécifique en infrarouge, les bandes d'absorption observées autour de 1700 cm^{-1} correspondent par exemple aux vibrations de la liaison des groupements carbonyles.

Les liaisons C-O simples induisent une absorption comprise entre 1000 et 1200 cm^{-1} et l'absorption aux nombres d'onde élevés (plus de 2700 cm^{-1}) est due aux vibrations des liaisons C-H. *La figure 2.2* suivante montre le spectre infrarouge de la fenchone.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

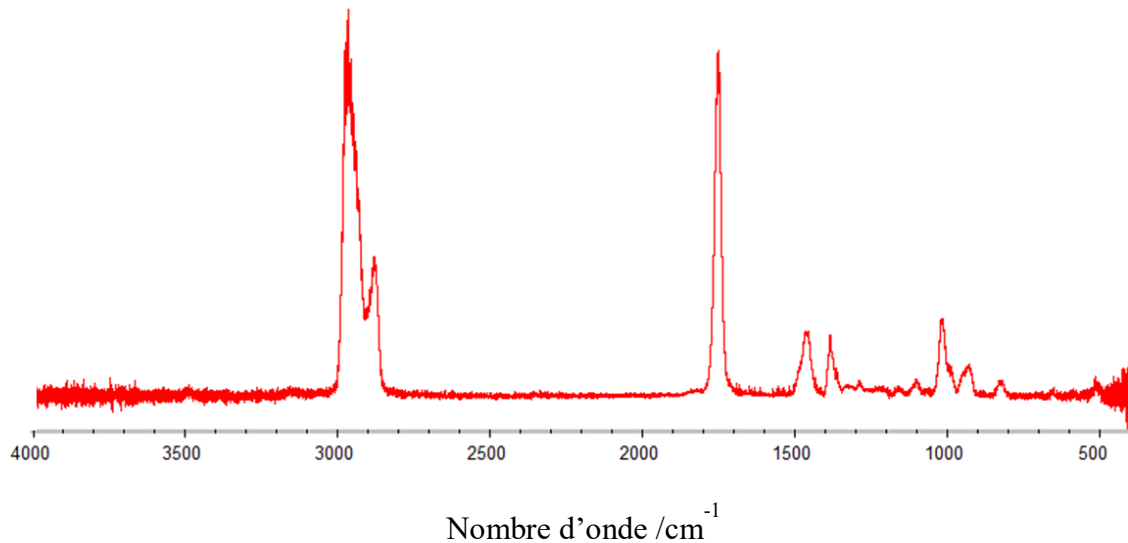


Figure 2. 2: Spectre infrarouge de la fenchone à T cellule = 145° C, P=200 mbar.

2.1.8 La chromatographie en phase gazeuse

La chromatographie en phase gazeuse est une méthode séparative des molécules d'un mélange multicomposant, basée sur l'interaction d'un composé avec une phase stationnaire (la colonne) et une phase mobile (le gaz vecteur + échantillon). Le chromatographe se compose de trois éléments : un injecteur, une colonne mise dans une enceinte thermostatée et un détecteur. L'échantillon à analyser est comprimé à une pression 750 Torr à l'aide d'un piston précédant l'injecteur.

Trois types de détecteurs sont utilisés :

- Le TCD (Thermal Conductivity Detector) ou catharomètre : détecteur universel utilisé pour quantifier O₂ et H₂ basé sur la différence de conductivité thermique entre l'analyte et le gaz vecteur N₂.
- Le FID (Flame Ionisation Detector) : le gaz évacué par la colonne passe à travers une flamme hydrogène /air. Ainsi l'échantillon est détruit et crée des particules chargées qui engendrent une différence de potentiel entre les deux électrodes constituant ce détecteur. Une très grande variété d'espèces peut être détectée, et l'intensité dépend de la nature et la concentration de l'analyte passant au sein de la flamme.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

- Le spectromètre de masse sépare des espèces par leur rapport masse/charge et permet d'obtenir principalement des informations sur la structure des espèces analysées selon des lois de fragmentation.

Chaque composé est élué à un temps caractéristique. La nature de la colonne ou le gradient de température peuvent être modifiés afin d'optimiser la séparation. Lorsqu'un composé est élué, il génère un signal électrique au niveau du détecteur et un pic apparaît sur le chromatogramme. La surface de ce pic est proportionnelle à la concentration du composé élué, l'identification peut être réalisée soit par comparaison des temps de rétention avec des standards ou bien par couplage avec une autre méthode analytique tel que la spectrométrie de masse.

Dans le cadre de ce travail, trois appareils ont été utilisés. *Le tableau 2.1* résume les conditions analytiques utilisées pour les analyses en chromatographie en phase gazeuse.

Tableau 2. 1: Système analytique utilisé dans le cadre de ce travail.

| Appareil | Colonne | Gaz vecteur | Programme | Espèces mesurées | Détecteur |
|-------------------------------------|--|-------------------------------|---|---------------------------------------|-----------|
| Shimadzu GC2010 Plus | CP-SIL 5CB | He 0,7mL.min ⁻¹ | Variable | Hydrocarbures et Espèces oxygénées | FID/MS |
| | L=25m | | | | |
| | D _{int} =0,32mm | | | | |
| | D _f =1,2μm | | | | |
| | Couplée avec DB1 | | | | |
| | L=30m | | | | |
| D _{int} =0,53mm | N ₂ | T ₀ =50°C | H ₂ , O ₂ | TCD | |
| D _f =3μm | | | | | |
| CP-Carboplot P7 | | | | | |
| L=25m | | | | | |
| D _{int} =0,53mm | | | | | |
| D _f =50μm | | | | | |
| Shimadzu GC2010 Plus | CP-Al ₂ O ₃ /KCl | He 1,5mL.min ⁻¹ | T ₀ =70°C ΔT=10°/min T _f =200°C Isotherme :10min | Hydrocarbures non- oxygénés | FID |
| | L=50m | | | | |
| | D _{int} =0,32mm | | | | |
| | D _f =5μm | | | | |

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

2.1.9 Comparaison des résultats en utilisant les différentes méthodes

La mesure des espèces en infrarouge est parfois délicate en raison du recouvrement des régions d'absorptions respectives, donc il est important de réaliser une comparaison entre les analyses en CPG et celles en infrarouge. La comparaison entre différents CPG permet également de détecter un problème lié à l'analyse, comme une coélution. Les hydrocarbures non oxygénés et les composés légers (notamment le propène, l'éthylène et le méthane) peuvent être quantifiés avec les différents appareils analytiques à l'exception du CPG/TCD. *La figure 2.3* présente un exemple de résultats obtenus pour le méthane et l'éthylène à 10 atm en mélange stœchiométrique avec les différents dispositifs analytiques, lors de l'oxydation de 1000 ppm de fenchone. Cette comparaison permet d'avoir une première estimation de la variabilité des mesures obtenues avec des dispositifs analytiques.

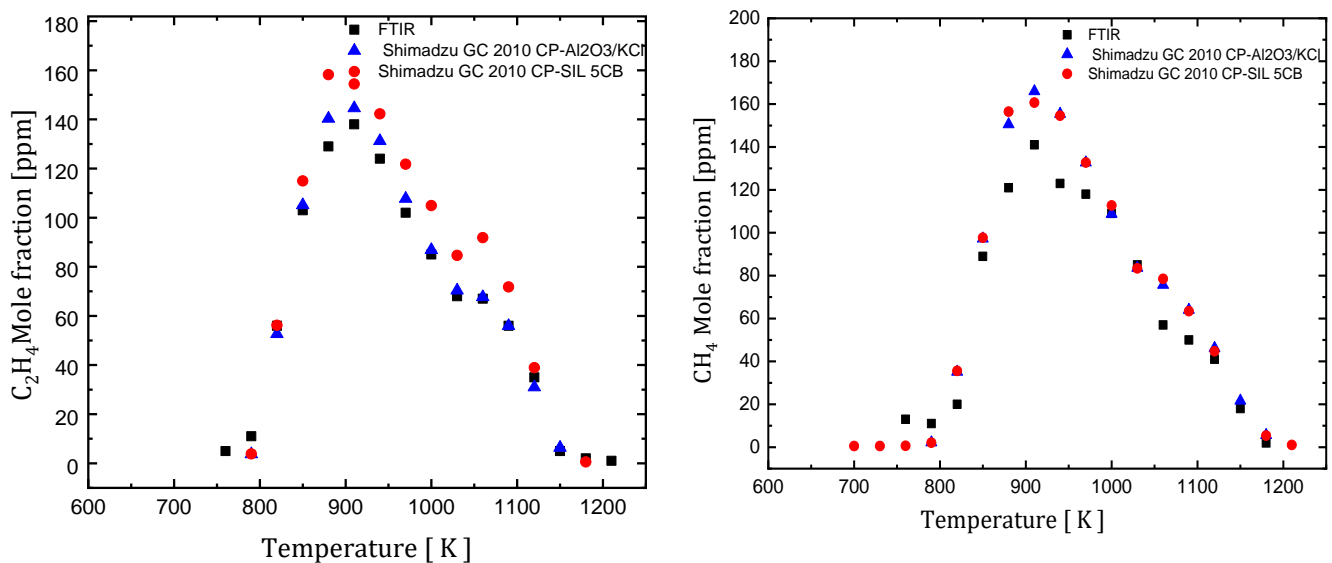


Figure 2. 3: Comparaison des résultats obtenus pour le méthane et l'éthylène suivant les différents dispositifs d'analyse pour 1000 ppm de fenchone à 10 atm, $\tau=0.7s$ et $\phi=1$.

2.1.10 Evaluation des incertitudes

Il est important d'évaluer les incertitudes liées aux données expérimentales afin de se rendre compte de leur fiabilité et d'aider à la validation des modèles cinétiques.

A chaque étape de l'expérience, l'incertitude est toujours liée à l'hétérogénéité de la température qui est de l'ordre de 5 K. Il existe également une incertitude liée aux débits appliqués : les débitmètres sont calibrés régulièrement, mais la conversion des débits en tension

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

de consigne peut être source de déviation. A l'échelle du dispositif analytique, l'erreur principale provient des incertitudes liées aux coefficients de réponse utilisés sur les différents CPG, dépendant de la qualité de l'étalon et de l'étalonnage. De plus, lorsqu'aucun étalon n'était disponible, la méthode des carbones équivalents [69] a été étudiée, induisant une incertitude supplémentaire. Enfin la séparation obtenue en CPG peut avoir un impact non négligeable. En effet, la présence des coélutions peut déformer les pics et donc l'évaluation des fractions molaires sera faussée.

L'incertitude totale (conditions limites réacteur + mesure) est ainsi difficile à quantifier mais peut être évaluée à environ 15%. Elle est déduite des bilans de carbone, d'hydrogène et d'oxygène réalisés en fin de chaque expérience, qui consistent à comparer la quantité de ces trois éléments contenus dans les espèces déjà quantifiées à celle présente initialement dans le carburant. Dans le cadre de notre travail, les bilans réalisés sur le carbone, l'oxygène et l'hydrogène sont estimés à environ $100 \pm 15\%$.

2.2 Machine à Compression Rapide

2.2.1 Description et principe du montage expérimental

La machine à compression rapide (MCR) est un équipement expérimental permettant d'étudier l'allumage des carburants à des températures allant de 600 à 1200 K et à des pressions de 5 à 80 bar.[70 -71]

La MCR utilisée est composée de quatre parties principales comme illustrée dans *la figure 2.4*.

- La chambre de combustion où le mélange fenchone/O₂/diluant est comprimé par le piston.
- Un système hydraulique [diamètre 120 mm, volume 3,9 L] qui permet de verrouiller et bloquer le piston en fin de compression, ainsi les mouvements vibratoires du piston sont évités.
- Un système pneumatique [diamètre 250 mm, volume 15,7 L] qui permet de générer la force motrice afin d'entraîner le piston et comprimer le mélange gaz - carburant dans la chambre de combustion.
- Le piston comporte un interstice (crevice), qui permet d'éviter la formation de vortex, d'assurer l'homogénéité de la charge et l'hypothèse du cœur adiabatique du mélange réactif [72- 73]

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

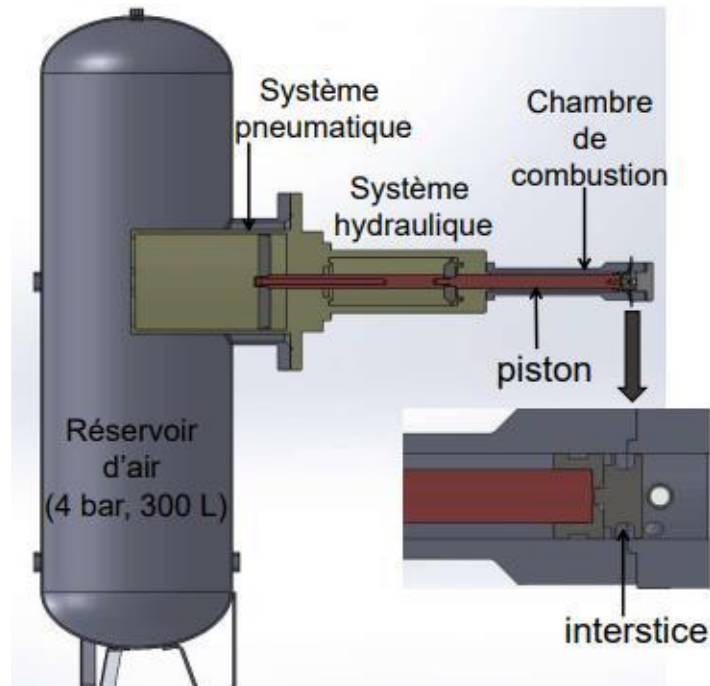


Figure 2. 4: Schéma de la MCR de PRISME (Université d'Orléans).

La pression d'admission est mesurée par un transducteur de pression piézoélectrique *Keller PAA-33X/80794* tandis que l'historique de la pression de la chambre de combustion est enregistré par un transducteur piézoélectrique *AVL QH32C*. Les thermocouples de type K sont utilisés pour mesurer la température du réservoir et du piston. Les débits massiques des gaz sont régulés par le *Bronkhorst Cori-flow M13*.

La température à la fin de la compression avec l'hypothèse du cœur adiabatique est calculée grâce à la relation isentropique :

$$\int_{T_0}^{T_c} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{dT}{T} = \ln\left(\frac{P_c}{P_0}\right)$$

Où T_c et P_c sont la température et la pression à la fin de la compression et T_0 , P_0 la température et pression d'admission, γ rapport des capacités calorifiques $\left(\frac{C_p}{C_v}\right)$ à volume et pression constants.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

Tableau 2. 2:Caractéristiques de la MCR utilisées dans le cadre de cette étude.

| | |
|--|---------|
| Course | 300 mm |
| Piston | 50mm |
| Taux de compression | 8,38 |
| Cale | 25,7 mm |
| Diamètre interne de la chambre de combustion | 50 mm |

Les caractéristiques utilisées dans le cadre de ce travail sont résumées dans le *tableau 2.2*.

2.2.2 Introduction des réactifs

Le mélange fenchone/O₂/diluant est injecté dans le réservoir dont le volume est de 4,18 L afin de préparer ce mélange avant son introduction dans la chambre de combustion. La fenchone est introduite à l'aide d'une seringue : pour cela une masse est pesée avec précision via la balance *PHOENIX instrument BTG-3030*. Le calcul de cette masse sera en fonction de la masse molaire du carburant et des conditions expérimentales telles que la richesse et la dilution. Le mélange réactif est chauffé à la même température que celle du réservoir pour éviter le phénomène de condensation et permet de réaliser plusieurs essais.

2.2.3 Acquisition des données

Le temps de compression est défini comme le temps écoulé entre le début et la fin du déplacement du piston. Le délai d'auto inflammation est défini comme la durée entre l'arrêt du piston au point mort et le maximum de la dérivée temporelle (point d'inflexion) de la pression. A l'aide de ce profil, on peut déterminer la pression au point mort haut.

Entre l'arrêt du piston au point mort haut et l'auto-inflammation, un temps (délais d'auto-inflammation) de l'ordre de ms peut s'écouler, suffisant pour occasionner des pertes thermiques. L'évolution effective de la pression et de la température dans les conditions isochores due à ces pertes thermiques est représentée dans les simulation par une évaluation adiabatique du volume en fonction du temps comme décrit par Tanaka et al [74].

Ce profil de volume est obtenu en réalisant des expériences non réactives où O₂ est remplacé par N₂ dont les capacités calorifiques sont proches. Cela implique que les conditions initiales (P₀, T₀) sont similaires à celles des expériences réactives.

Le profil de pression des tirs d'un mélange réactif et non réactif dans une machine à compression rapide est illustré dans *la figure 2.5*.

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

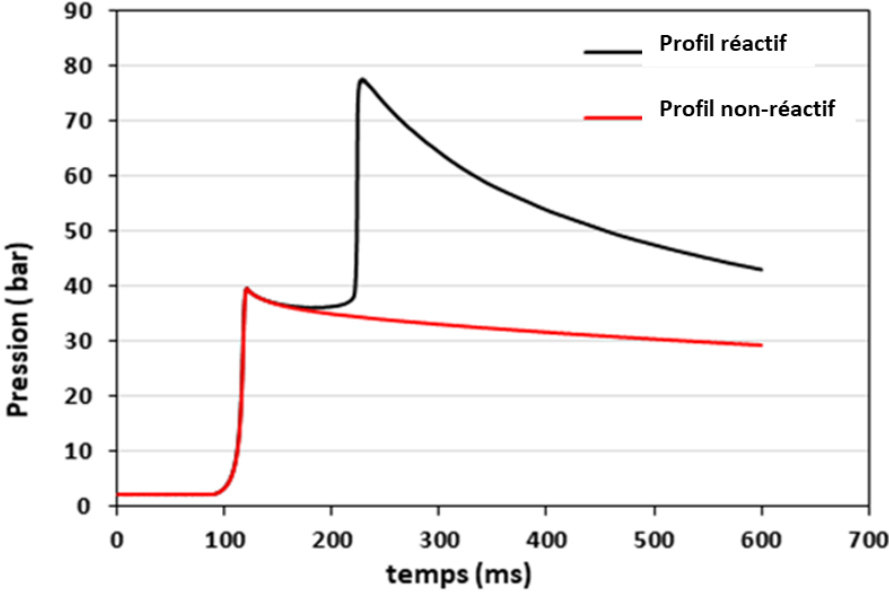


Figure 2. 5: Profil de pression d'un essai réalisé en machine à compression rapide ($\phi=0,5$, $T_c=794$ K, $P_c=39,62$ bar, diluent (Ar 70%-N2=30%)).

Chapitre 2 : Dispositifs expérimentaux

Références du chapitre 2

- [66] J. J. Evangelista, R. Shinnar, et S. Katz, « The effect of imperfect mixing on stirred combustion reactors », *Symposium (International) on Combustion*, vol. 12, n° 1, p. 901-912, janv. 1969, doi: 10.1016/S0082-0784(69)80470-4.
- [67] P. Dagaut *et al.*, « A jet-stirred reactor for kinetic studies of homogeneous gas-phase reactions at pressures up to ten atmospheres », *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, vol. 19, n° 3, p. 207-209, mars 1986, doi: 10.1088/0022-3735/19/3/009.
- [68] D. Matras et J. Villiermaux, « Un réacteur continu parfaitement agité par jets gazeux pour l'étude cinétique de réactions chimiques rapides », *Chemical Engineering Science*, vol. 28, n° 1, p. 129-137, janv. 1973, doi: 10.1016/0009-2509(73)85093-6.
- [69] K. Schofield, « The enigmatic mechanism of the flame ionization detector: Its overlooked implications for fossil fuel combustion modeling », *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 34, n° 3, p. 330-350, doi: 10.1016/j.pecs.2007.08.001.
- [70] M. D. Le, « L'étude de l'influence de la structure chimique des additifs sur le contrôle de la réactivité des carburants », These de doctorat, Université de Lorraine, 2020.
- [71] M. Pochet, V. Dias, B. Moreau, F. Foucher, H. Jeanmart, et F. Contino, « Experimental and numerical study, under LTC conditions, of ammonia ignition delay with and without hydrogen addition », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, n° 1, p. 621-629, 2019, doi: 10.1016/j.proci.2018.05.138.
- [72] Y. Wu, M. Yang, C. Tang, Y. Liu, P. Zhang, et Z. Huang, « Promoting “adiabatic core” approximation in a rapid compression machine by an optimized creviced piston design », *Fuel*, vol. 251, p. 328-340, sept. 2019, doi: 10.1016/j.fuel.2019.04.030.
- [73] G. Mittal et C.-J. Sung, « Aerodynamics inside a rapid compression machine », *Combustion and Flame*, vol. 145, n° 1-2, p. 160-180, avr. 2006, doi: 10.1016/j.combustflame.2005.10.019.
- [74] S. Tanaka, F. Ayala, et J. C. Keck, « A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine », *Combustion and Flame*, vol. 133, n° -9.

Chapitre III

Outils de modélisation de réacteurs idéaux

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

| | |
|--|-----------|
| Chapitre 3 : Modélisation..... | 43 |
| 3.2.1 Fichier “ Mécanisme.inp “ | 44 |
| 3.2.2 Les constantes de vitesse dépendantes de la pression | 45 |
| 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques “ therm.dat “ | 46 |
| 3.2.4 Le fichier de données de transport “ tran.dat “ | 47 |
| 3.3.1 Le modèle de réacteur continu parfaitement agité (Perfectly Stirred Reactor) | 48 |
| 3.3.2 Le modèle de réacteur homogène fermé (Closed Homogenous Batch Reactor).. | 49 |
| 3.3.1 La librairie PREMIX de flamme laminaire prémélangée (Premixed Laminar Flame- Speed) | 50 |
| References du chapitre 3 | 51 |

Chapitre 3 : Modélisation

Dans ce chapitre nous allons décrire la traduction et la mise en œuvre du schéma cinétique au moyen du package Chemkin Pro et les formalismes thermocinétiques utilisées dans le cadre de cette étude.

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

3.1 Principe de fonctionnement du package Chemkin Pro 2022

Chaque mécanisme cinétique détaillé est composé d'une base de donnée cinétique dénommée mécanisme réactionnel et d'une base de données thermodynamiques relatives aux espèces du mécanisme. Ces fichiers sont utilisés par les différentes bibliothèques de calcul de Chemkin.

La structuration hiérarchisée d'un grand mécanisme détaillé en une somme de sous-mécanismes (mécanismes primaires, mécanismes secondaires et mécanismes de base) permet d'orienter la construction de ce mécanisme.

Ce code lit trois fichiers :

- Le mécanisme réactionnel
- Le fichier de données thermodynamiques
- La base de données de transport

Outre ces fichiers, un fichier d'entrée précise les conditions de l'étude.

3.2 Formalisme

3.2.1 Fichier " Mécanisme.inp "

Ce fichier est composé de trois parties, relatives à la déclaration des éléments, des espèces et des paramètres cinétiques des réactions.

Ces constantes de vitesse doivent être produites sous forme de la loi d'Arrhenius modifiée (dite d'Arrhenius-Kooij) qui permet de représenter les déviations sub ou super-Arrhenius de la constante cinétique [75] :

$$k = A T^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

Cette courbure dans l'espace d'Arrhenius résulte notamment du caractère multi-puits de la surface d'énergie potentielle associée à ces étapes « élémentaires » [76].

Avec

| | |
|----------------|---|
| k | La constante de vitesse |
| A | Facteur pré exponentiel |
| T | Température en K |
| E _a | L'énergie d'activation de la réaction. |
| R | Constante des gaz parfaits |
| n | Facteur traduisant la déviation d'un comportement d'Arrhenius idéal |

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

3.2.2 Les constantes de vitesse dépendantes de la pression

Depuis la marginalisation de l'hypothèse radiative de Jean Perrin aux réactions photochimiques [77]. Il est acquis que le transfert d'énergie nécessaire à l'atteinte de l'énergie d'activation par les réactifs correspond à une interaction collisionnelle intermoléculaire (dont la fréquence dépend de la pression) suivi par une redistribution intramoléculaire de cette énergie [78]. La théorie de Lindemann distingue trois régimes différents : le régime basse pression, la zone de <<fall-off>>, et le régime haute pression. En régime basse pression, la constante de vitesse évolue de manière linéaire en fonction de la pression. Par contre, dans la zone de fall-off, à plus haute pression, la réaction évolue de façon non linéaire. Et enfin, le dernier régime est indépendant de la pression et la constante de vitesse est à sa limite haute pression. [79]

Ces trois régimes sont présentés à *la figure 3.1*.

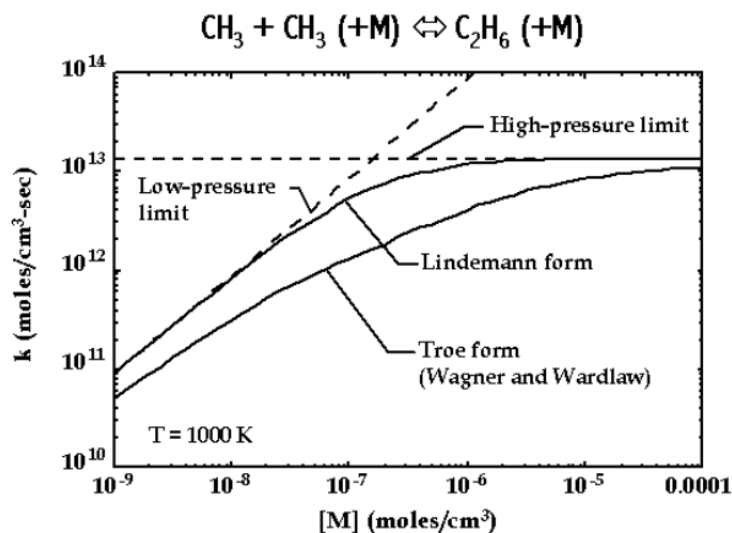
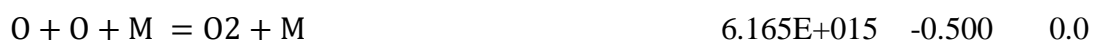


Figure 3. 1: L'évolution des constantes de vitesse selon les trois régimes liés à la pression [80].

Ce type de réaction nécessite un partenaire de collision que l'on nomme M, pouvant être n'importe quelle espèce présente dans le milieu. Son efficacité dans le milieu réactionnel est variable et caractérisée par un coefficient, ici supposé indépendant de la température, qui peut être rajouté pour une espèce donnée, comme décrit par cet exemple :



H₂/ 2.50/ H₂O/ 12.00/ Ar/ 0.83/ CO/ 1.90/ CO₂/ 3.80/ He/ 0.83/

Dans cet exemple, le M est sans parenthèse, ce qui veut dire que la constante est déclarée avec la dépendance à [M] d'un régime basse pression. Lorsque (M) est utilisé, il est nécessaire de

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

fournir a minima la constante de vitesse basse pression (k_0), ainsi que la constante de vitesse en limite haute pression (k_∞).

Des formalismes plus réalistes sont disponibles dans Chemkin, permettant de décrire la dépendance de la vitesse de conversion de l'intermédiaire « énergisé » introduit par Lindemann avec son niveau énergétique, comme celui de Troe ou le formalisme PLOG.

3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques “ therm.dat “

Les fonctions d'états (enthalpie, entropie) dépendent de la température. La NASA a développé un formalisme polynomial par morceaux permettant de décrire ces fonctions d'états sur une large gamme de température [81].

Les propriétés thermodynamiques d'une espèce i se présentent dans ce fichier, sous un ensemble de 14 coefficients polynomiaux (a_i) déterminés dans un domaine de température.

La première ligne indique le nom de l'espèce dans le mécanisme, puis précise la composition élémentaire de l'espèce (dans le cas de la fenchone (10 atomes de carbone, 16 atomes en hydrogène et 1 pour O), sa charge (ici c'est 0) et sa phase (g) pour indiquer gazeuse).

```
Fenchone          c 10h 16o 1   G      100.000    5000.000      987.66      1
2.17239490E+01  5.04228447E-02 -1.88467329E-05  3.51547483E-09 -2.53598792E-13  2
-4.21617408E+04 -9.37114554E+01 -7.49053434E-01  7.78229370E-02  3.61552549E-05  3
-9.88264058E-08  4.21593278E-11 -3.46198953E+0  3.01361885E+01  4
```

Les coefficients en rouge sont utilisés entre 987,66 K et 5000K, les autres coefficients en bleu sont utilisés entre 100 K et 987,66 K.

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4$$

$$\frac{H_f}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T}$$

$$\frac{S^0}{R} = a_1 \ln(T) + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7$$

a_n : les différents coefficients polynomiaux

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

À l'aide des équations suivantes (qui se déduisent par des relations de Kirchhoff) on peut en déduire les autres paramètres thermodynamiques : (L'enthalpie libre G et la capacité calorifique à volume constant C_v) grâce à la relation de Mayer et la définition de l'enthalpie libre de Gibbs.

$$C_v = C_p - R$$

$$G = H - TS$$

L'enthalpie libre permet alors de calculer la constante d'équilibre de la réaction, utilisée dans un cadre thermodynamique consistant pour calculer la constante inverse selon $k_b = k_f / K_{eq}$ où $\ln K_{eq}$ est donnée par le quotient de l'opposé l'enthalpie libre de réaction par RT .

3.2.4 Le fichier de données de transport “ tran.dat “

Les données de transport sont utilisées dans le cas des simulations des vitesses de flammes prémélangées laminaires réalisées avec le module PREMIX [82] pour calculer les coefficients de transport D_i (voire les coefficients binaires D_{ij}) présentés plus loin. Il est nécessaire de fournir un troisième fichier “ tran.dat “ dans le cas du code de calcul Premix, ce fichier contient les données de transport des espèces incluses dans le mécanisme.

Ce fichier se présente en sept colonnes, ces données ont été tirées à partir du site web RMG :

| | | | | | | |
|----------|---|---------|------|---|---|---|
| Fenchone | 2 | 4755.01 | 8.02 | 0 | 0 | 0 |
|----------|---|---------|------|---|---|---|

- La première colonne : le nom de l'espèce.
- La deuxième colonne contient un nombre qui indique la géométrie de l'espèce. Dans le cas d'une espèce non-linéaire ce nombre vaut 2.
- Potentiel de Lennard-Jones $\frac{\epsilon}{k}$ en Kelvin.
- Le diamètre de collision de Lennard - Jones σ en Angstrom.
- Le moment dipolaire μ en Debye.
- La polarisabilité α en Angstrom cubique.
- La dernière colonne est un coefficient correctif pour la fonction de partition de l'énergie rotationnelle.

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

3.3 Les différentes bibliothèques de Chemkin Pro 2022

En fonction des différentes programmations et du type de réacteur utilisé, dans le cadre de ce travail, les simulations ont été réalisées suivant trois modèles différents :

- Le modèle de réacteur continu parfaitement agité
- Le modèle d'un réacteur fermé
- Le modèle des flammes laminaires unidimensionnelles de prémélange

3.3.1 Le modèle de réacteur continu parfaitement agité (Perfectly Stirred Reactor)

Le modèle considère que le réacteur est parfaitement homogène à l'échelle intégrale en température et en concentration (modèle 0D), fonctionnant en régime permanent, permettant d'écrire le bilan suivant pour l'espèce i :

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{1}{\tau} (Y_i^{in} - Y_i) + \frac{\omega_i W_i}{\rho}$$

Avant de réaliser un calcul, l'utilisateur doit définir un certain nombre de paramètres qui sont :

- Le temps de séjour τ
- La température et la pression qui impactent le terme source ω_i et la densité ρ
- La composition du mélange (fraction massique Y_i)

- **Fichier d'entrée**

Dans ce fichier d'entrée, l'utilisateur doit introduire les conditions opératoires caractérisant le système à étudier : il faut donc fournir la composition du mélange en entrée, la température "TEMP" et pression "PRES", le temps de passage "TAU", et le volume du réacteur "VOL". Deux options de solveur sont disponibles (transitoire et état stationnaire). Dans ce travail, les calculs ont été effectués en état stationnaire (membre de gauche de l'équation nul) en se basant sur un système de continuation de résolution à température de réacteur décroissante, à l'aide du mot-clef "CNTN".

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

3.3.2 Le modèle de réacteur homogène fermé (Closed Homogenous Batch Reactor)

Le code de calcul du réacteur homogène permet de simuler le comportement chimique d'un mélange homogène gazeux dans un système fermé, en fonction du temps. Le bilan d'espèces dans le cas volume constant est donc un cas particulier de l'équation du paragraphe précédent avec un premier terme d'entrée-sortie nul dans le membre de droite.

Dans le cadre de cette étude ce modèle a été utilisé pour simuler les résultats expérimentaux obtenus en machine à compression rapide. D'autres types de problèmes de cinétique chimique en phase homogène peuvent être considérés dans le cas où le système est adiabatique et isotherme ou bien est isochore et isotherme. Dans ces problèmes, le dégagement de chaleur n'est pas important car les réactions ne sont pas fortement exothermiques ou le mélange est fortement dilué.

- **Fichier d'entrée**

Le fichier d'entrée permet de préciser la pression, la température initiale du système et la composition du mélange. Les mots-clefs sont respectivement : " PRES " : la pression initiale du mélange, " TEMP " : la température initiale du mélange de gaz.

- Le mot-clef " TIME " indique la durée au cours de laquelle la simulation est terminée
- Le mot-clef " CONV " permet d'indiquer que le système à étudier serait dans un état adiabatique et à volume constant.
- " REACT " Nom des réactifs et leur fraction molaire
- " DELT " incrément du temps

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

3.3.1 La librairie PREMIX de flamme laminaire prémélangée (Premixed Laminar Flame- Speed)

Ce code permet de simuler les flammes prémélangées laminaires 1D. Ces flammes sont unidimensionnelles, de ce fait les mesures détaillées des profils de température et des espèces sont facilitées. Ce code nécessite un fichier contenant les données de transport des différentes espèces car l'équation bilan d'espèce contient un terme de diffusion massique supplémentaire faisant intervenir un coefficient D_i :

$$u \frac{dY_i}{dx} - D_i \frac{d^2 Y_i}{dx^2} = \frac{\omega_i W_i}{\rho}$$

- **Fichier d'entrée**

Le premier mot clef "FREE" pour indiquer le type de problème que le code peut résoudre est une flamme de propagation libre et adiabatique La température est calculée à partir de l'équation de conservation de l'énergie (ENRG).

Les domaines de calcul sont ensuite réalisés selon les mots clés suivants :

- "XEND" hauteur de la flamme
- "XCEN" position estimée du front de flamme
- "WMIX" largeur estimée de la zone réactionnelle
- "NPTS" nombre de points initial dans le domaine de calcul
- "TEMP" la température en fonction de la distance le long de la flamme. Les unités sont en cm et le profil de température en K. La température ne peut qu'augmenter avec la distance.
- "PROD" le nom de l'espèce et les fractions molaires des produits estimées
- "GRAD" et "CURV" ces deux mots clefs fixent les critères de convergence pour les dérivées d'ordre un et deux respectivement.

Chapitre 3 : Outils de modélisation de réacteurs idéaux

References du chapitre 3

- [75] V. H. Carvalho-Silva, N. D. Coutinho, et V. Aquilanti, « Temperature Dependence of Rate Processes Beyond Arrhenius and Eyring: Activation and Transitivity », *Front. Chem.*, vol. 7, p. 380, mai 2019, doi: 10.3389/fchem.2019.00380.
- [76] I. R. Sims, « Tunnelling in space », *Nature Chem*, vol. 5, n° 9, p. 734-736, sept. 2013, doi: 10.1038/nchem.1736.
- [77] « N°219 - novembre-décembre 1998 - L'Actualité Chimique, le journal de la SCF », Société Chimique de France (SCF). [En ligne]. Disponible sur: <https://new.societechimiquedefrance.fr/numero/n219-novembre-decembre-1998/>
- [78] J. Troe, « Unimolecular Reactions. 2. Aufl., von K.A. Holbrook, M.J. Pilling und S.H. Robertson. Wiley, Chichester, 1996. 417 S., geb. 90.00 £ -ISBN 0-417-92268-4 », *Angew. Chem.*, vol. 109, n° 5, p. 549-550, mars 1997, doi: 10.1002/ange.19971090532.
- [79] S. Thion, « Etude expérimentale et numérique de la cinétique d'oxydation de biocarburants lignocellulosiques : cétones, éthers et lévulines », Thèse de doctorat, Orléans, 2016. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.theses.fr/2016ORLE2036>
- [80] « ChemKin_Theory_PaSR.pdf ». Consulté le: 26 juin 2023. [En ligne]. Disponible sur: https://personal.ems.psu.edu/~radovic/ChemKin_Theory_PaSR.pdf
- [81] S. Gordon et B. J. McBride, « Thermodynamic Data to 20,000 K For Monatomic Gases ». 1 juin 1999.
- [82] R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke, J. A. Miller, et E. Meeks, « PREMIX: A FORTRAN Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames ».

Chapitre IV

Développement d'un mécanisme cinétique

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

| | |
|---|-----------|
| Chapitre 4 | 53 |
| 4.1 Mécanismes de combustion des hydrocarbures | 54 |
| 4.1.1 Mécanismes de combustion | 54 |
| 4.1.1.1 Les réactions d'oxydation à haute température----- | 54 |
| 4.1.1.2 Les réactions d'oxydation à basse température----- | 55 |
| 4.2 Construction du mécanisme cinétique | 56 |
| 4.2.1 Principe de fonctionnement du logiciel RMG | 56 |
| 4.2.2 La représentation des espèces et des groupes fonctionnels | 57 |
| 4.2.3 Bases de données RMG | 58 |
| 4.2.4 Discussion sur le mécanisme cinétique développé | 59 |
| 4.2.4.1 Les réactions de métathèse avec H et le radical CH ₃ | 61 |
| 4.2.4.2 Réaction de β-scission | 66 |
| 4.2.5 Changements apportés au mécanisme cinétique | 75 |
| 4.3 Principe de construction d'un mécanisme cinétique | 77 |
| 4.4 Conclusion | 78 |
| Références du chapitre 4 | 79 |

Chapitre 4

La combustion se caractérise notamment par une suite de réactions chimiques élémentaires. Les aspects thermodynamiques et cinétiques seront présentés dans un premier temps. Par la suite, ce chapitre sera consacré à la description du mécanisme cinétique développé pour l'oxydation de la fenchone, la première partie débutera par la description du code de réacteur chimique utilisé. La deuxième partie sera dédiée à une discussion du mécanisme cinétique de la fenchone et des processus élémentaires mis en jeux.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

4.1 Mécanismes de combustion des hydrocarbures

4.1.1 Mécanismes de combustion

Les réactions mises en jeu lors de la combustion d'un carburant sont les réactions thermiques radicalaires qui dépendent fortement de la structure de l'hydrocarbure :

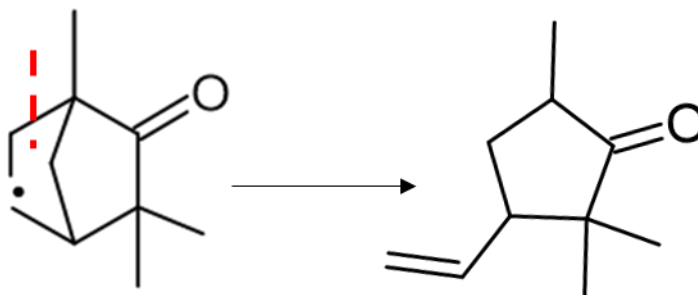
Les réactions d'amorçage unimoléculaire ne font intervenir que les espèces stables, leurs constantes de vitesse dépendent de l'énergie de liaison via une relation d'Evans-Polanyi. Les réactions d'amorçage bimoléculaire avec l'oxygène, consistent en un transfert d'atome d'hydrogène de l'hydrocarbure vers l'oxygène pour former le radical HO₂

4.1.1.1 Les réactions d'oxydation à haute température

Les principales réactions que peuvent subir les radicaux issus du carburant en régime à haute température, sont généralement les métathèses, les réactions de β-scission et d'isomérisation.

La métathèse intervertit un groupe d'atomes entre deux espèces. Les réactions de β scission permettent des ruptures de liaisons, C-O- situées en position β du site radicalaire et la formation d'une insaturation sur la liaison adjacente du site radicalaire.

Un exemple sur un des radicaux de la fenchone qui se décompose par la coupure de la liaison C-C en un autre radical nommé 4-ethenyl-1,3,3-triméthyl-2-oxocyclopentyl :



Les réactions d'isomérisation permettent la migration d'un atome d'hydrogène lié à un atome de carbone ou d'oxygène à travers un état de transition cyclique. La géométrie de l'état de transition cyclique induit une contrainte sur l'angle de certaines liaisons σ.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

4.1.1.2 Les réactions d'oxydation à basse température

L'oxydation à basse température est beaucoup plus variée et beaucoup plus complexe, il s'agit d'un processus faiblement exothermique à des températures au-dessous de 800 K[83].

Les principales voies réactionnelles à basse température sont résumées dans le schéma d'oxydation présenté sur la *Figure 4.1*.

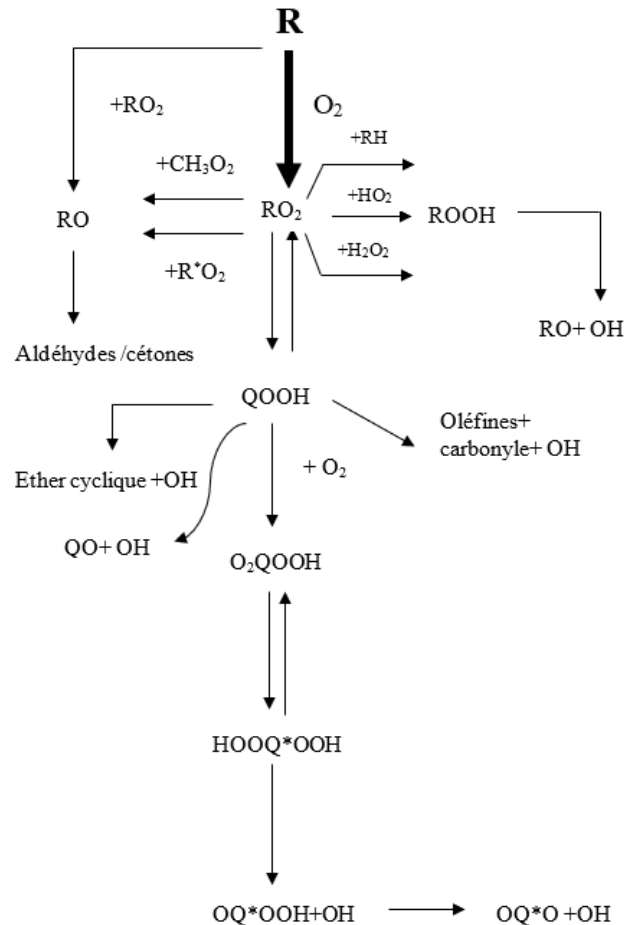
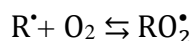
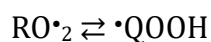


Figure 4. 1: Différentes voies de réactions à basse température pour un alcane [84].

Selon ce mécanisme, la réaction la plus importante faisant suite à l'arrachement d'un atome d'hydrogène, consiste en l'addition de l'oxygène moléculaire sur le radical alkyle formé pour former un radical alkylperoxy :



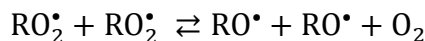
Ensuite ce radical peroxy formé va s'isomériser pour donner un radical hydroperoxy



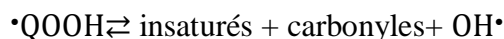
ou par élimination de HO_2^{\bullet} pour former des espèces insaturées.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

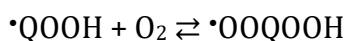
Les hydroperoxy peuvent réagir entre eux pour donner des radicaux alkoxy $RO\cdot$ et libérer de O_2 :



Le radical $\cdot QOOH$ formé précédemment peut subir une cyclisation pour former un éther cyclique et libérer un radical hydroxyle, éliminer un radical $HO_2\cdot$ et former des oléfines :



Une deuxième addition sur O_2 peut intervenir pour former $\cdot OOQOOH$



Un oxohydroperoxyde est enfin formé par transfert d'un atome d'hydrogène et rupture de la liaison O-OH. La dernière étape de ce processus consiste en la décomposition de l'oxohydroperoxyde. L'ensemble de ces voies réactionnelles de basse température est résumé sur la *figure 4.1* qui représente les chemins majeurs du régime de basse température.

4.2 Construction du mécanisme cinétique

En raison de la taille importante du mécanisme cinétique mis en jeu, la détermination des intermédiaires réactionnels et l'estimation préliminaire des données thermocinétiques associées est générée par le code open source RMG dans sa version 3.0 [85] choisie.

4.2.1 Principe de fonctionnement du logiciel RMG

RMG (Reaction Mechanism Generator) est un générateur automatique de mécanismes de réaction qui utilise des connaissances chimiques connues stockées dans une base de données ainsi que des méthodes d'estimation des paramètres pour générer des mécanismes cinétiques chimiques détaillés qui peuvent ensuite être utilisés comme entrée dans un logiciel de simulation de réacteur 0D (par exemple Chemkin ou Cantera). Les trois principales capacités requises pour tout code de génération automatique de mécanismes de réaction sont [86]:

- une représentation unique et non ambiguë des espèces chimiques connues
- une méthode pour déterminer quelles réactions peuvent se produire entre les espèces
- un moyen d'estimer les paramètres cinétiques et thermodynamiques.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

Ces paramètres thermodynamiques peuvent être estimés pour les structures chimiques en utilisant soit la méthode de contribution des groupes de Benson [87], soit un réseau de neurones entraîné sur des données obtenues à un niveau post Hartree-Fock [88].

4.2.2 La représentation des espèces et des groupes fonctionnels

Dans RMG, les molécules sont décrites à l'aide de listes d'adjacences qui peuvent être générées en saisissant un identifiant de l'espèce de type chaîne de caractères, notamment SMILES, InChi, un numéro CAS, ou le nom de l'espèce. Les espèces neutres contenant les éléments H, C, O, Ar, N sont prises en charge. La liste d'adjacence d'une molécule est présentée à la *figure 4.2*.

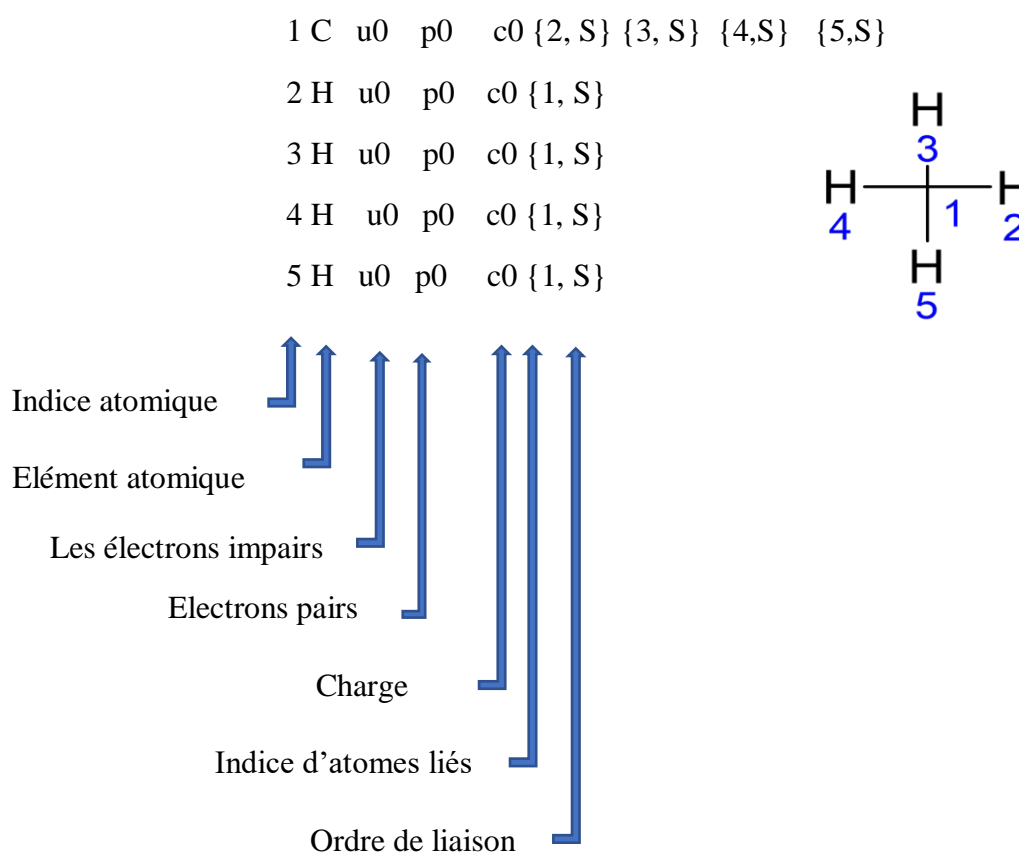


Figure 4. 2: Description des listes d'adjacences pour le cas du méthane.

La première colonne indique l'indice de l'atome, la deuxième colonne indique l'élément atomique, la troisième colonne indique le nombre d'électrons non appariés associés à chaque atome et est précédée de la lettre minuscule "u" représentant "non apparié".

La 4e colonne indique le nombre de paires solitaires associées à chaque atome et est précédée de la lettre minuscule "p" représentant "paires", la 5e colonne indique la charge formelle de

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

l'atome précédée de la lettre minuscule "c" représentant "charge". Les valeurs entre parenthèses indiquent la présence d'une liaison, la première valeur entre parenthèses indique l'indice atomique de l'atome auquel l'atome courant est lié, et la deuxième valeur indique si la liaison est simple "S", double "D", triple "T".[89]

4.2.3 Bases de données RMG

- **Cinétique**

Les constantes de vitesse dans la base de données cinétiques sont déterminées à partir des structures des réactifs. Les champs d'identifiants acceptent les SMILES, InChI, ou bien le nom de l'espèce.

- **Thermodynamique et les données de transport**

Pour trouver les propriétés de transport ou de thermochimie d'une espèce il faut saisir l'identifiant de cette espèce comme évoqué précédemment dans la représentation des espèces et des groupes fonctionnels. RMG estime les paramètres du potentiel de Lennard-Jones à partir des propriétés critiques (- température et pression critiques) via les corrélations empiriques de Tee et al. [90].

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

4.2.4 Discussion sur le mécanisme cinétique développé

La modélisation de la cinétique d'oxydation de la fenchone a été réalisée à l'aide Chemkin Pro[91]. Aucun mécanisme décrivant la cinétique de combustion de la fenchone n'étant disponible dans la littérature, le mécanisme présenté dans le cadre de ce travail a été généré à partir du site web RMG[92] et des analogies avec d'autres hydrocarbures similaires puis intégré dans le mécanisme C₅ [93]. Dans le paragraphe qui suit, des modifications et ajouts apportés seront présentés et le mécanisme cinétique de la fenchone sera détaillé. Les paramètres cinétiques et thermodynamiques associés à la plupart des réactions impliquées dans la consommation et la formation des espèces intermédiaires sont issus de RMG. Le sous-mécanisme cinétique de la fenchone, les réactions les plus importantes sont présentées dans le *tableau 4.3*.

Nous avons considéré la formation de six radicaux possibles à partir des réactions de métathèse. Parmi les hydrocarbures à haute densité énergétique, des similitudes structurales peuvent être établies entre la fenchone et le norbornane (ainsi que le 2-éthylnorbornane) pour lesquels il existe des études théoriques limitées. Par exemple, Wang et al. [94] ont récemment calculé les énergies de liaison du 2-éthylnorbornane, du norbornadiène et du quadricyclane au niveau de théorie CCSD(T)/cc-PVTZ//B3LYP/6-311++G(d,p).

Par analogie avec leurs résultats, F2 (*figure 4.4*) apparaît comme le radical le moins susceptible de se former avec une énergie de liaison C-H d'environ 107 kcal.mol⁻¹, suivi de F1 (*figure 4.4*) avec 104-105 kcal.mol⁻¹. Les énergies de liaisons C-H aux positions F5-F6 et F3-F4 sont assez similaires aux énergies des liaisons C-H primaires et secondaires dans les alcanes.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

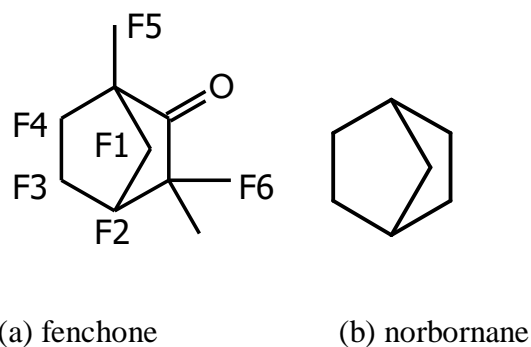


Figure 4. 3: Structure de la fenchone et emplacement des radicaux primaires (a), structure du norbornane (b).

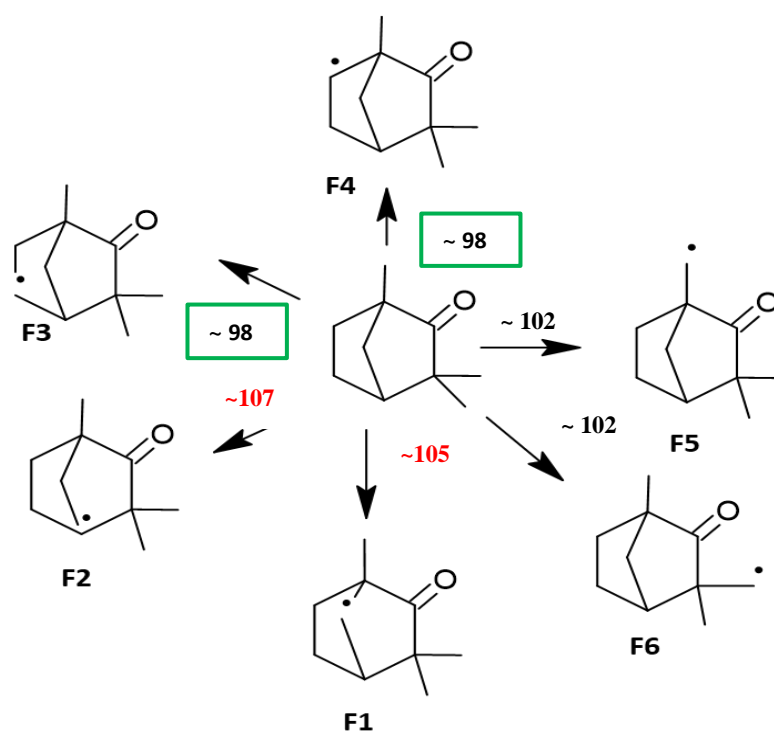


Figure 4. 4: Radicaux obtenus par métathèse sur la fenchone, ainsi que les énergies de liaison menant à la formation des radicaux en kcal.mol⁻¹ [94].

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

Quelques modifications des paramètres thermocinétiques ont été entreprises pour améliorer l'accord avec les profils d'espèces mesurés. Pour simplifier l'analyse, les mécanismes primaires F3 et F4 ont été considérés comme équivalents, contrairement à F1, et sont donc supposés être formés selon la même constante de vitesse. De même, F5 et F6 ont également été considérés comme équivalents, F6 étant formé deux fois plus que F5 en raison du nombre d'atomes H disponibles.

4.2.4.1 Les réactions de métathèse avec H et le radical CH₃

Les constantes de vitesse des réactions de métathèse avec l'atome hydrogène H, et le radical méthyle, CH₃, sont présentées dans le *tableau 4.1*; elles ont été calculées de la même façon que dans le cas du radical méthyle. Ces réactions sont en général plus rapides avec l'atome hydrogène qu'avec le radical méthyle.

Tableau 4. 1: Paramètres d'Arrhenius pour les constantes de vitesse des réactions de métathèse avec H et CH₃.

| Reactions | R=H | | | R= CH ₃ | | |
|-------------------------|----------------------|------|------|-----------------------|------|---------|
| | A | n | Ea | A | n | Ea |
| R+fenchone= RH +F1(1) | 6.01×10 ³ | 3.02 | 5600 | 7.9×10 ⁻³ | 4.29 | 11036.4 |
| R +fenchone= RH +F2(11) | 4.17×10 ³ | 3.02 | 6050 | 3.40×10 ⁻³ | 4.29 | 12302.6 |
| R +fenchone= RH +F3(5) | 1.92×10 ⁹ | 1.50 | 5750 | 6.48×10 ⁶ | 1.87 | 8780 |
| R +fenchone= RH +F4(3) | 1.92×10 ⁹ | 1.50 | 5750 | 6.48×10 ⁶ | 1.87 | 8780 |
| R +fenchone= RH +F5(9) | 6.66×10 ⁵ | 2.54 | 6756 | 6.0×10 ¹² | 0.0 | 1262 |
| R +fenchone= RH +F6(7) | 1.33×10 ⁶ | 2.54 | 6756 | 1.2×10 ¹³ | 0.0 | 1262 |

Les constantes de vitesse pour les réactions de méthatèse par H, CH₃ et OH ont été estimées par analogie avec des sites similaires et comparées à celles proposées par RMG. La *figure 4.5* nous montre une comparaison entre les différentes constantes de vitesses pour des arrachements d'hydrogène sur les atomes de carbone secondaires avec les constantes de vitesse trouvées sur RMG et celles qui servent de référence.

Les réactions d'arrachement d'hydrogène par H et CH₃ mènent à la formation des radicaux F1 et F2. Les constantes de vitesse estimées par Gao et al.[95] présentent des écarts importants avec celles proposées par RMG ainsi que les estimations de Sivaramakrishnan et al [96] Cependant, les constantes de vitesse calculées pour l'arrachement de H chez les alcanes selon le site C-H diffèrent typiquement de moins d'un ordre de grandeur des estimations de RMG.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

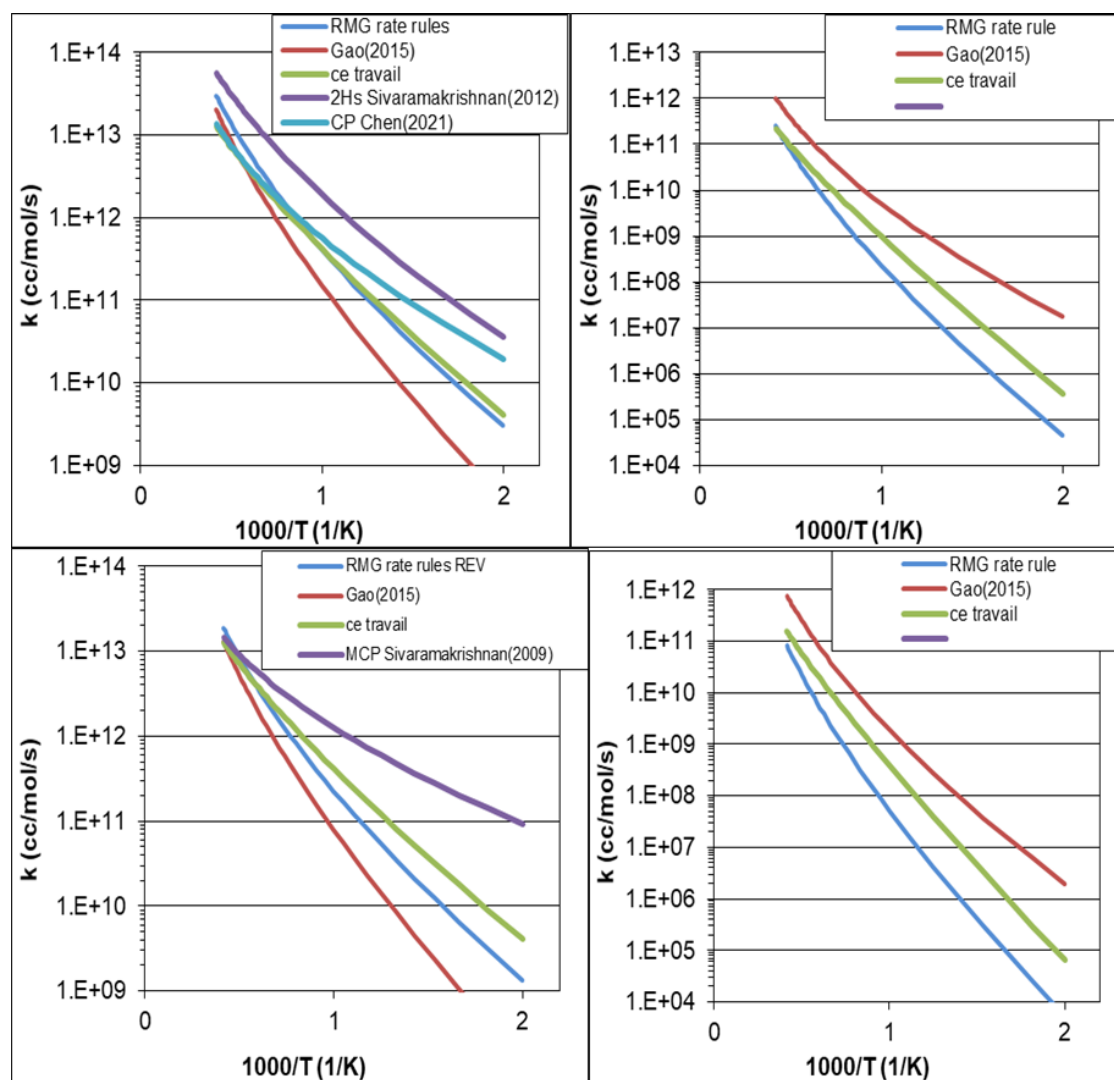


Figure 4. 5 : Comparaison des constantes de vitesse de métathèse par l'atome hydrogène H (à gauche) et par le radical méthyle CH_3 (à droite) pour former F1(en haut) et F2 (en bas) proposées par RMG avec celles qui servent de références.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

Dans le cas des radicaux F3 et F4, supposés être formés à la même vitesse, les constantes de vitesse des réactions d'arrachement d'hydrogène par l'atome H et celles pour les réactions d'arrachement par le radical CH₃ sont présentées dans La *figure 4.6*. Comme on peut le voir, ces constantes de vitesse sur ces sites d'arrachement conviennent mieux que celles de Gao et al.[95] et celles proposées par RMG.

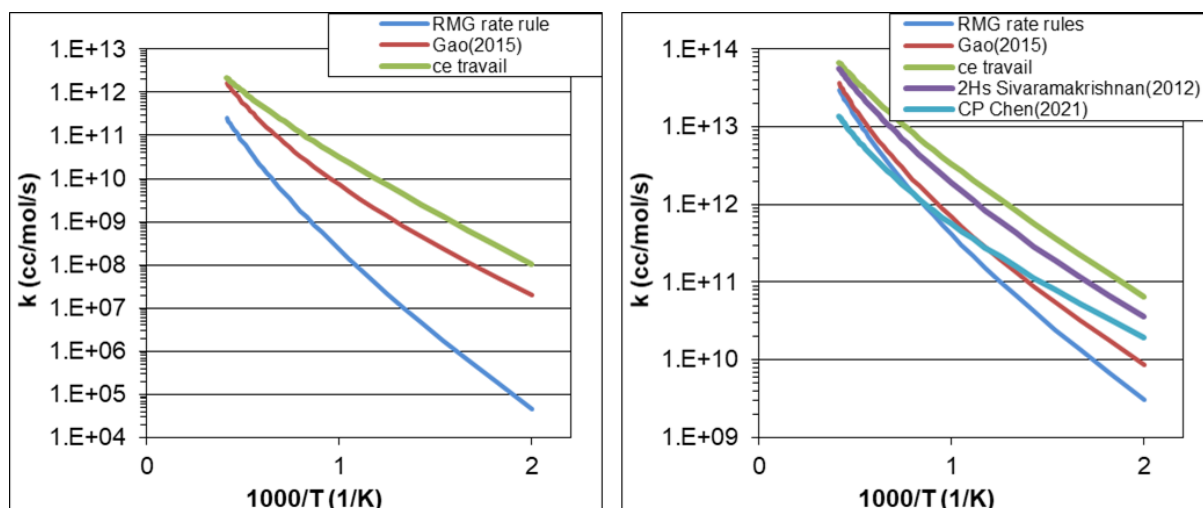


Figure 4. 6: Comparaison des constantes de vitesse des réactions d'abstraction par l'atome H (à droite) et par le radical méthyle, CH₃, (à gauche) pour former les radicaux F3 et F4.

Les réactions d'initiation unimoléculaire par rupture de la liaison C-H sont issues de RMG et tiennent compte de la dépendance à la pression (les constantes de vitesse à 10 atm ont été considérées dans ce travail). Les étapes d'initiation bimoléculaire ont également été prises en compte et tirées de RMG[92]. Les réactions d'addition-élimination ont également été considérées. La formation de biradicaux prédite par la cinétique de RMG s'est avérée négligeable dans nos conditions et n'a donc pas été incluse. Le *tableau 4.2* regroupe les différentes constantes de vitesse des métathèses avec O, OH et HO₂ déterminées lors de ce travail.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

Tableau 4. 2: Paramètres cinétiques (unités en cm, mol, cal, s) des réactions de métathèses par O, OH, HO₂.

| Réactions | A | n | Ea |
|--|------------------------|------|-------|
| O+fenchone = OH+F1(1) | 1.11×10^{03} | 3.19 | 14117 |
| O+fenchone = OH+ F2(11) | $3.83 \times 10^{+05}$ | 2.41 | 14800 |
| O+fenchone = OH+ F3(5) | $1.11 \times 10^{+03}$ | 3.19 | 14117 |
| O+fenchone = OH+ F4(3) | $1.11 \times 10^{+03}$ | 3.19 | 14117 |
| O+fenchone = OH+ F5(9) | $9.34 \times 10^{+03}$ | 3.02 | 5230 |
| O+fenchone = OH+ F6(7) | $1.87 \times 10^{+04}$ | 3.02 | 5230 |
| OH+fenchone = H ₂ O+ F1(1) | $1.40 \times 10^{+07}$ | 1.60 | 470.9 |
| OH+fenchone = H ₂ O + F2(11) | $6.87 \times 10^{+05}$ | 1.91 | 875.2 |
| OH+fenchone = H ₂ O + F3(5) | $4.64 \times 10^{+07}$ | 1.61 | -35 |
| OH+fenchone = H ₂ O + F4(3) | $4.64 \times 10^{+07}$ | 1.61 | -35 |
| OH+fenchone = H ₂ O + F5(9) | $1.35 \times 10^{+00}$ | 3.81 | -2897 |
| OH+fenchone = H ₂ O + F6(7) | $2.70 \times 10^{+00}$ | 3.81 | -2897 |
| HO ₂ +fenchone = H ₂ O ₂ + F1(1) | $5.6 \times 10^{+12}$ | 0.0 | 17686 |
| HO ₂ +fenchone = H ₂ O ₂ + F2(11) | $2.8 \times 10^{+12}$ | 0.0 | 16013 |
| HO ₂ +fenchone = H ₂ O ₂ + F3(5) | $5.6 \times 10^{+12}$ | 0.0 | 17686 |
| HO ₂ +fenchone = H ₂ O ₂ + F4(3) | $5.6 \times 10^{+12}$ | 0.0 | 17686 |
| HO ₂ +fenchone = H ₂ O ₂ + F5(9) | $1.14 \times 10^{+02}$ | 3.19 | 16250 |
| HO ₂ + fenchone =H ₂ O ₂ +F6(7) | $2.28 \times 10^{+02}$ | 3.19 | 16250 |

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

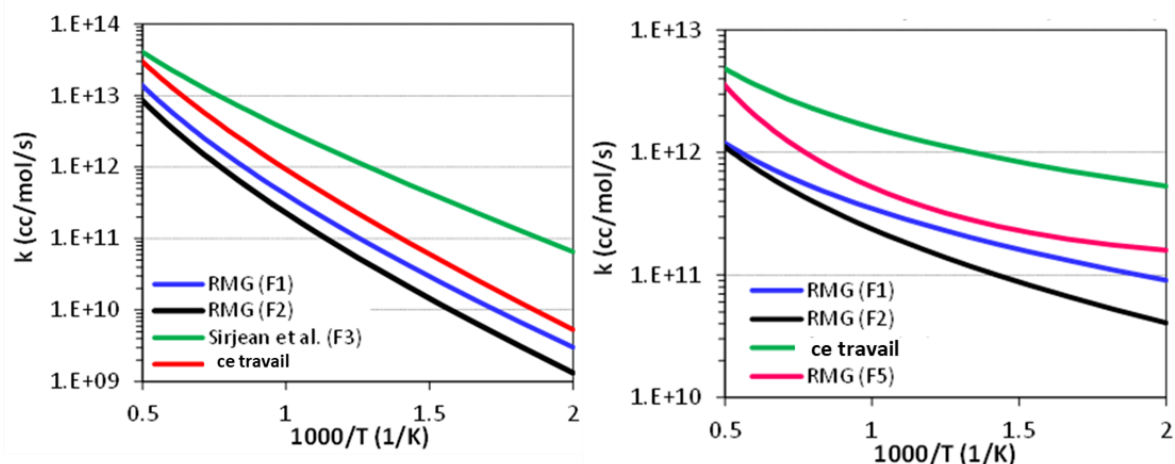


Figure 4. 7: Constantes de vitesse pour les réactions de métathèse d'hydrogène par l'atome d'hydrogène (à gauche) et OH (à droite). La constante de vitesse de F3 et celles de F4 sont censées être identiques, tandis que celle de F6 est deux fois plus élevée que celle de F5.

Pour les réactions de métathèse par l'atome hydrogène, H, la **figure 4.7** montre les constantes de vitesse calculées par Sirjean et al. [97] pour le norbornane et celles estimées par analogie pour la formation des radicaux F3 et F4. Pour les radicaux F5 et F6, des analogies avec des sites similaires dans les alcanes ont été considérées

et ; pour F1 et F2, les constantes de vitesse proposées par RMG ont été retenues.

Pour les réactions d'arrachement d'hydrogène par les radicaux OH, illustrées sur la **figure 4.7** (droite) ; les constantes de vitesse suggérées par RMG [92] ont été choisies, sauf pour les radicaux F3 et F4 (avec des énergies de liaison similaires à celles d'un site C-H secondaire dans un alcane) pour lesquels les constantes de vitesse générées par RMG [92] étaient les mêmes que pour le radical F1. Néanmoins, pour ces sites C-H secondaires, les constantes de vitesse utilisées pour les alcanes ont été choisies. Ces constantes de vitesse désignées par le terme "ce travail" dans la légende de la **figure 4.7** sont des constantes de vitesse typiques qui peuvent être utilisées pour les alcanes dans les réactions d'arrachement d'hydrogène ; les valeurs de ces constantes de vitesse pour les radicaux F3 et F4 ont été cependant multipliées par 2 pour rester dans le domaine d'incertitude tout en améliorant l'accord avec les mesures expérimentales [98]. Elles sont obtenues en considérant plusieurs constantes de vitesse de la littérature et en les ajustant sur une large gamme de température. Les paramètres cinétiques pour les réactions avec O et HO₂ proviennent de RMG. La réaction des radicaux stabilisés par résonance avec HO₂, donnant un aldéhyde (ou une cétone) et un radical plus petit, a été considérée avec une constante

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

de vitesse de $4,50 \times 10^{12} \text{ mol cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ [99]. Le même type de réactions avec O est également considéré et la constante de vitesse utilisée est celle estimée par RMG [92].

4.2.4.2 Réaction de β -scission

Les constantes de vitesses des réactions de β -scission et d'isomérisation sont issus des estimations de RMG. La *figure 4.8* illustre les radicaux formés à partir de ce type de réactions, afin d'avoir une idée sur les décompositions possibles des radicaux issus de l'oxydation de la fenchone.

On peut voir à partir de ce schéma que la rupture des liaisons C-H et C-C mène à la formation des espèces stables tels que le méthyl-cyclopentadiène et l'isoprène. Les radicaux formés se dissocient selon différentes voies par ruptures de liaisons C-C suivies par l'ouverture du cycle ou la formation d'une cétone cyclique insaturée.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

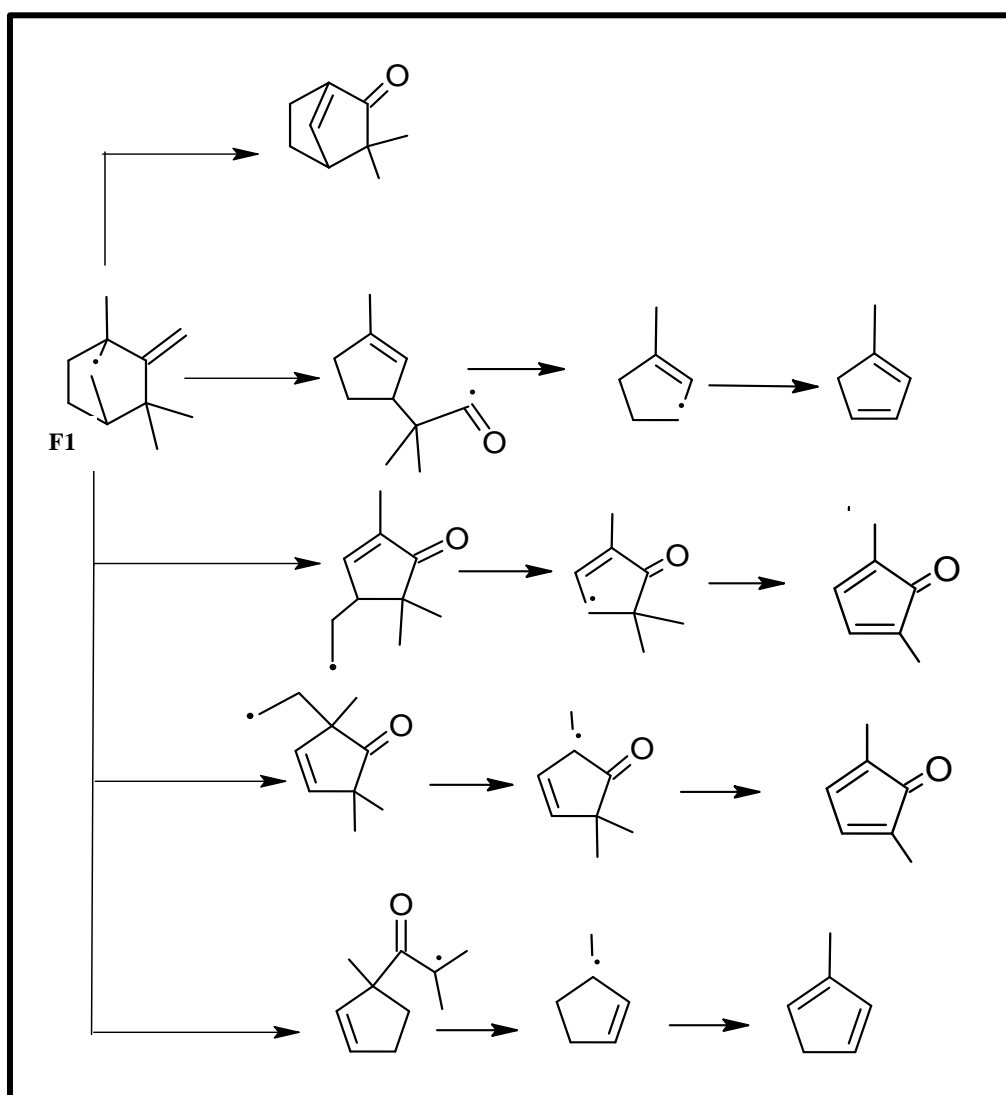


Figure 4. 8 : Voies de décompositions du radical F1

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

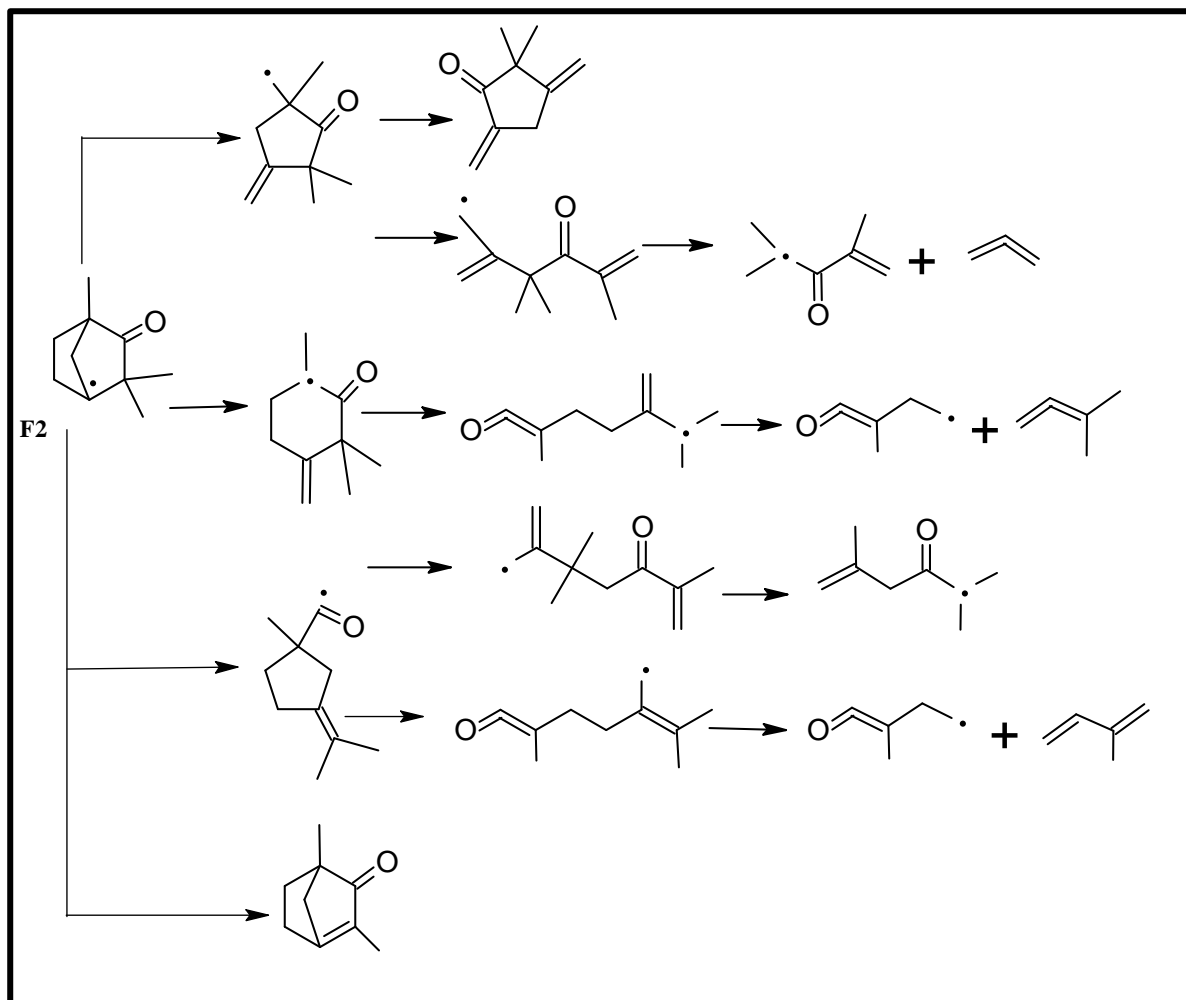


Figure 4. 9:Voies de décompositions du radical F2.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

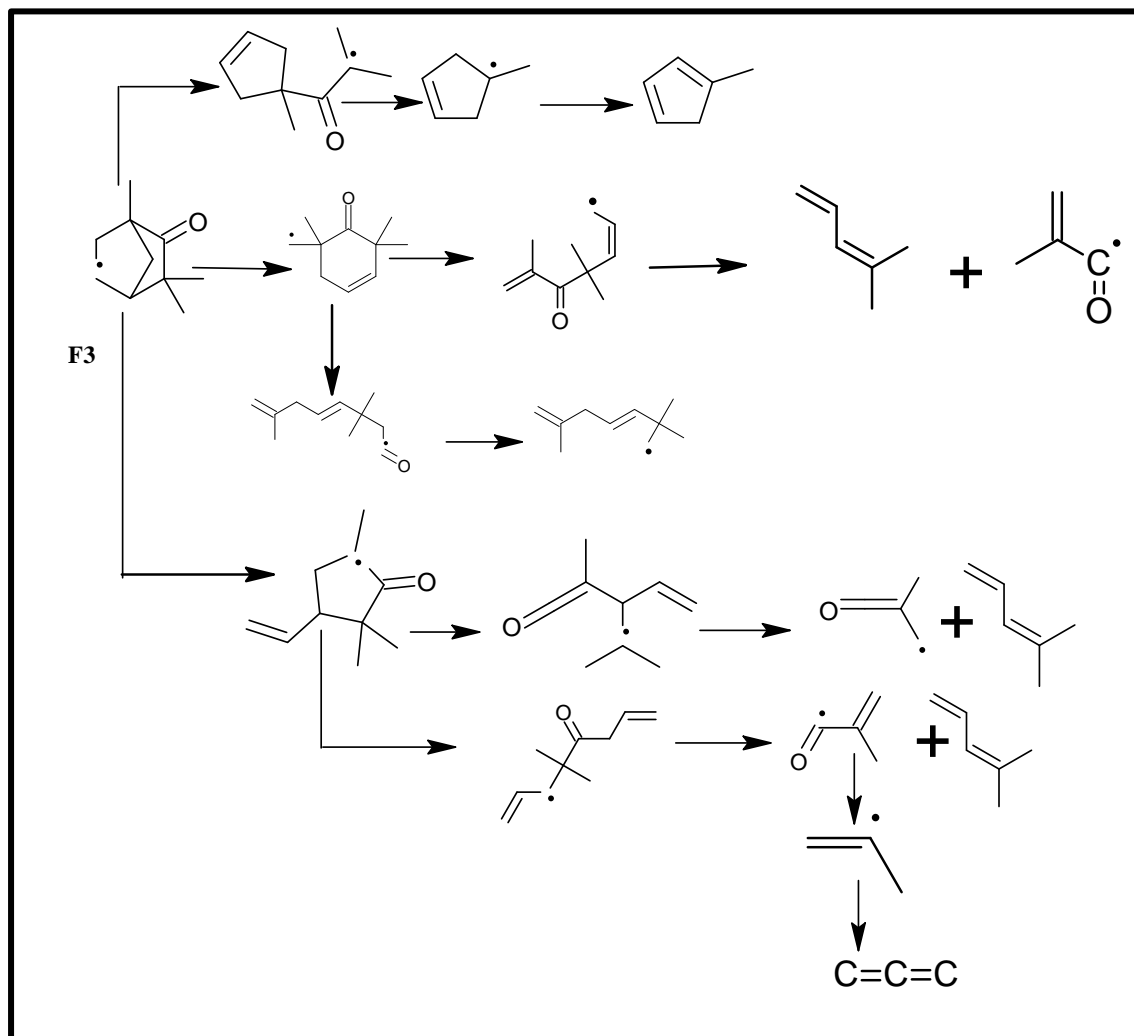


Figure 4. 10: Voies de décompositions du radical F3.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

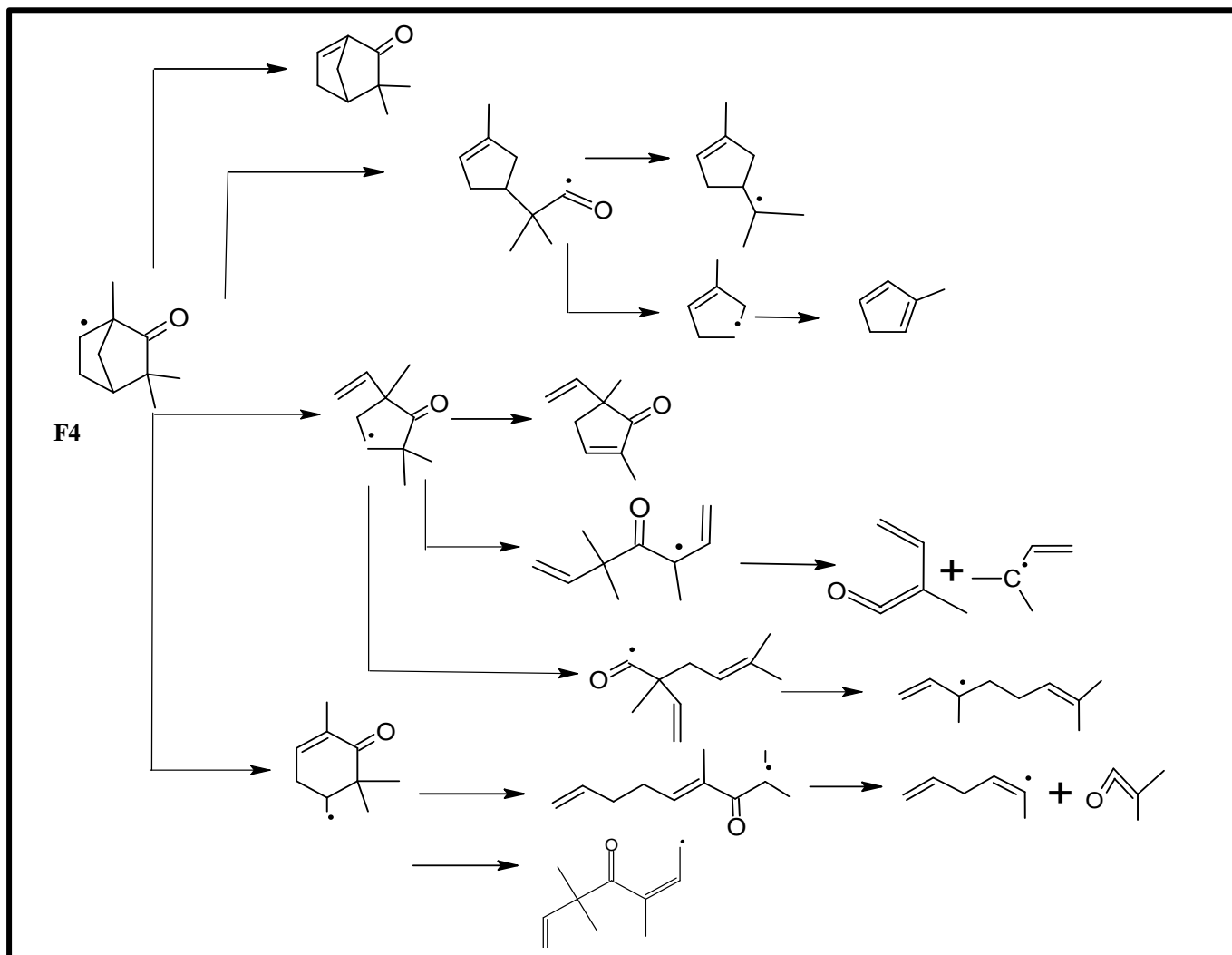


Figure 4. 11: Voies de décompositions du radical F4.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

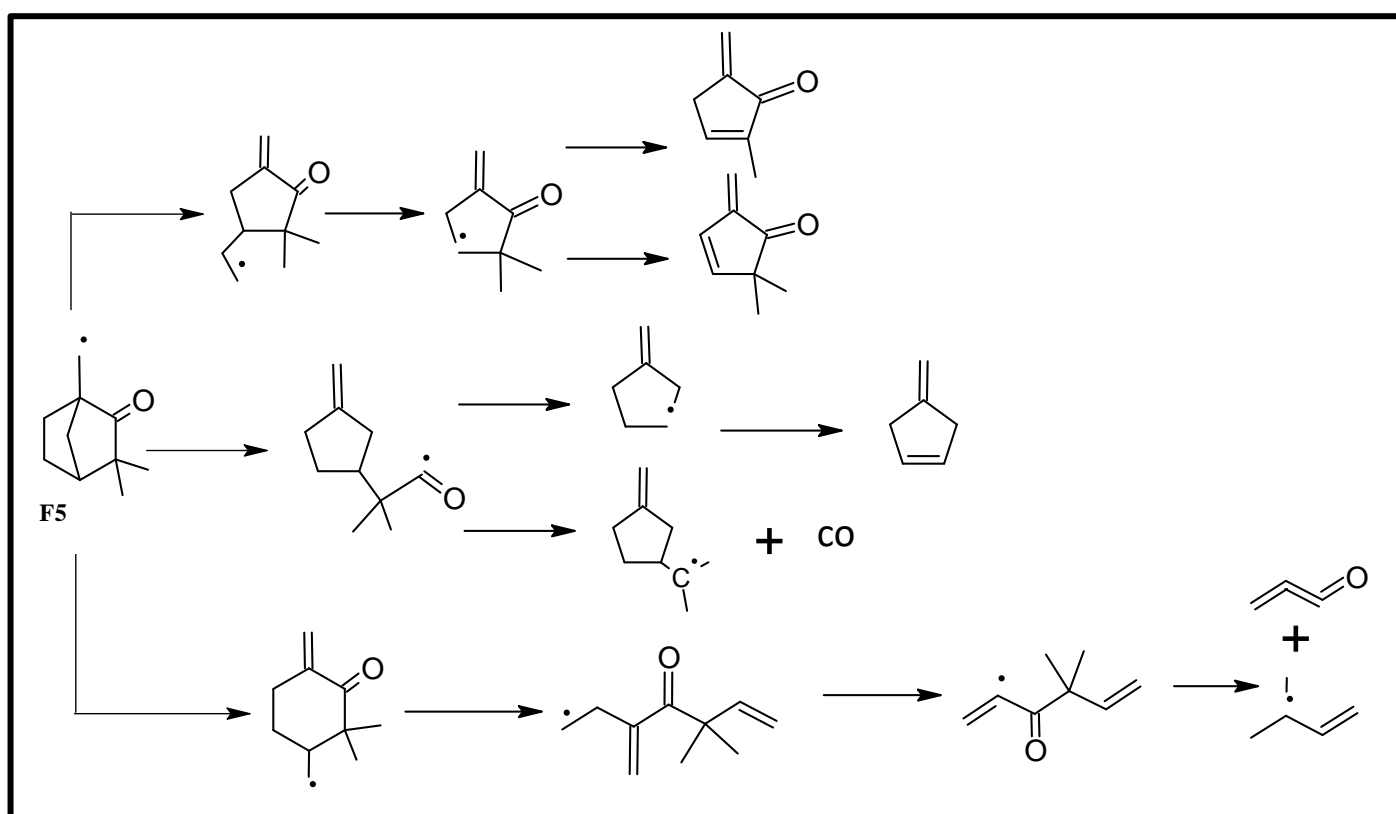


Figure 4. 12: Voies de décompositions du radical F5.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

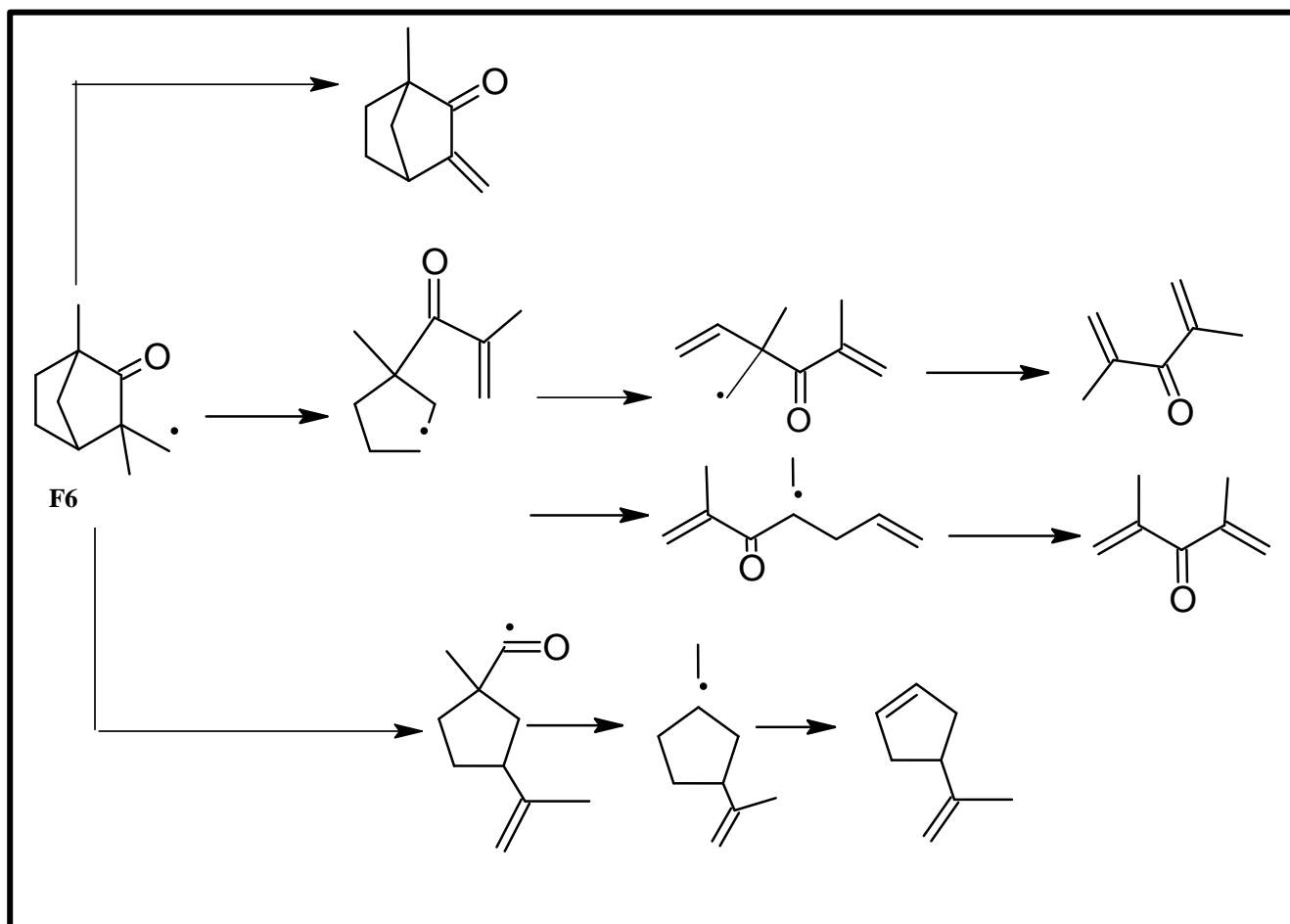


Figure 4. 13:Voies de décompositions du radical F6.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

Le *tableau 4.3* résume les constantes de vitesse des réactions impliquées dans la consommation et la production des espèces intermédiaires utilisées dans le mécanisme d'oxydation de la fenchone. Les formules squelettiques de ces espèces seront présentées en *annexe 4.1*.

Les propriétés thermochimiques de la majorité des espèces incluses dans ce mécanisme ont été évaluées par la méthode d'additivité de groupe implémentée dans RMG [92] et confrontées à des calculs de structure électroniques effectués avec la méthode G3.

Le fichier de mécanisme, le fichier de thermochimie, la nomenclature et les notations SMILES de ces espèces sont présentés et détaillés en annexe de ce manuscrit.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

Tableau 4. 3: Constantes de vitesse du mécanisme de la fenchone (A :cm³. mol⁻¹.s⁻¹, Ea :cal.mol⁻¹).

| F1(1) sub-mech | A | n | Ea |
|--------------------------------|------------|----------|-----------|
| F1(1)=GD (1) +ch3 | 9.38 E+21 | -1.36 | 101546.2 |
| F1(1)=GD (2) | 1.13 E+16 | -0.48 | 30116.3 |
| F1(1)=S (279) | 4.79 E+13 | 0.23 | 27452.4 |
| F1(1)=GD (3) | 3.98 E+14 | -0.07 | 30695.6 |
| F1(1)=S (660) | 6.92 E+11 | 0.63 | 23984.4 |
| GD (2) =c2h4+GD (7) | 8.53 E+09 | 0.76 | 17474.5 |
| GD (3) = c2h4 +GD (7) | 1.66 E+11 | 0.34 | 20999.6 |
| S (660) =ic3h6co+mcptsd2 | 4.55 E+02 | 2.41 | 28294.3 |
| S (279) = co+ GD (11) | 1.95 E+18 | -1.17 | 16546.1 |
| GD (7) =ch3 + GD (8) | 4.74 E+13 | 0.45 | 41411.6 |
| GD (7) = GD (9) | 9.35 E+09 | 1.64 | 48145.3 |
| GD (9) = co+ GD (10) | 7.07 E+20 | -2.80 | 31749.3 |
| GD (11) = GD (12) | 1.47 E+05 | 2.22 | 56572.1 |
| GD (12) = c2h4+ GD (10) | 2.09 E +13 | 0.15 | 36085.3 |
| GD (10) = c3h4-p+ic4h7v | 5.97 E+13 | 0.59 | 43858.5 |
| F2 sub-mech | A | n | Ea |
| F2 (11) = S (703) | 1.32 E +37 | -6.76 | 40216.1 |
| F2(11) = S (224) | 4.37 E+17 | -071 | 29066.7 |
| F2(11) = ZS (16) | 4.17 E+43 | -8.09 | 51534.7 |
| F2 (11) = ZS (19) +ch3 | 2.53 E+11 | 1.39 | 87331.4 |
| S (703) = ZS (20) | 1.85 E+11 | 0.80 | 26526.3 |
| ZS (20) = dipco-2d4j+c3h4-p | 1.60 E+10 | 0.94 | 42338.7 |
| S (224) = ZS(14) +co | 3.89 E+18 | -1.17 | 16546.1 |
| ZS (14) =ZS (15) | 2.09 E+09 | 1.53 | 33299.5 |
| ZS (23) = c5h8-12d3m+ic4h7 | 1.14 E +11 | 0.62 | 46331.6 |
| F3 sub-mech | A | n | Ea |
| F 3(5) = ZS (1) | 1.13 E +12 | 0.7 | 28987.2 |
| F3(5) = S (661) | 6.98 E +08 | 1.3 | 20704 |
| F 3 (5)= ZS (2) | 6.02 E +08 | 1.4 | 23134 |
| ZS (1) = ZS (3) | 1.31 E +17 | -0.6 | 33236 |
| S (661) =mcps2dt+ic3h6co | 5.21 E +20 | -1.387 | 44728 |
| ZS (2) = ZS (3) | 2.34 E +14 | -0.4 | 27350 |
| ZS (3) = ZS (5) +ch3 | 2.39 E +12 | 0.6 | 38280 |
| ZS (3) => c6h10-13d4m+coc3h5-t | 4.90 E +13 | 0.4 | 34447 |
| mcps2dt=mcps2dt+h | 1.02 E+04 | 3 | 30301.1 |
| F4 (3) sub-mech | A | n | Ea |
| F4(3) = GD (4) +ch3 | 1.90 E +13 | 0.84 | 85829.5 |
| F4(3) = GD (5) | 1.37 E +07 | 1.87 | 24946.9 |
| F 4(3) = GD (6) | 4.30 E +09 | 1.21 | 28900 |
| F 4(3) = S (376) | 1.25 E +16 | -0.5 | 27100 |
| GD (5) = ch3+ GD (13) | 3.83 E +15 | -0.4 | 30845.7 |
| GD (5) = GD (14) | 2.23 E +10 | 0.6 | 23739.1 |
| GD (5) = GD (15) | 1.94 E +14 | 0.1 | 29578.2 |
| GD (6) =co +GD (18) | 1.95 E+18 | -1.17 | 16546.1 |
| S (376) = GD (14) | 7.98 E+14 | -0.3 | 26613.8 |
| S (376) = GD (20) | 3.46 E+15 | 0 | 12412.6 |
| GD (15) = co+ GD (16) | 1.91 E +14 | -0.5 | 3582.1 |
| GD (14) =but3mldt+GD (17) | 6.07 E +14 | -0.4 | 47535.5 |
| GD (16) =isope+ic4h7v | 1.49 E+11 | 1.30 | 42869.8 |
| F5 (9) sub-mech | A | n | Ea |
| F5(9) =S(306) | 6.39 E+19 | -1.80 | 22481.8 |
| F5(9) =S(33) | 9.18 E+11 | 0.36 | 16522.2 |
| F5(9) =S(721) | 1.10 E-01 | 4.21 | 21839.3 |
| S(33)=co+c9h15 (38) | 4.65 E +17 | -1.2 | 16546.1 |
| S (306) =c2h4+S(206) | 2.43 E+13 | 0.1 | 27882.9 |
| S (260) = ch3+c7h8o(583) | 3.12 E+12 | 0.5 | 28006.4 |
| S (260) = GD(25) | 2.83 E+02 | 1.62 | 20154.3 |
| C9h15(41) =c9h15(38) | 2.32 E+36 | -8.1 | 15327 |
| C9h15(38) =c9h15(392) | 1.61 E+07 | 2.06 | 20679.5 |
| C9h15(392) =c2h4+GD(22) | 2.09 E+13 | 0.15 | 36085.2 |
| GD (22) =c3h4+ic4h7v | 6.66 E+10 | 1.07 | 36182.5 |
| C9h15(41) =c3h4-a+ GD(23) | 5.21 E+15 | -0.32 | 55103.4 |
| GD (23) = c2h4+ic4h7v | 5.13 E+10 | 0.97 | 35946.8 |
| S (582) =co+GD(22) | 1.22 E+20 | -2.11 | 27286.7 |
| S (721) = GD(24) | 2.71 E+29 | -4.70 | 24898.5 |
| GD (24) =c2h4+ GD (25) | 3.76 E6 | 0.52 | 29123.5 |
| GD (25) =S (2293) +but3mldt | 1.76 E+16 | 0.33 | 40143.1 |
| S (721) =GD (26) | 1.72 E+20 | -2.32 | 11088.4 |
| GD (26) =ic3h6co+GD (27) | 2.27 E+15 | 0.18 | 54272 |
| GD (27) =c3h4-a+c3h5-a | 8.11 E+08 | 1.33 | 19163.3 |
| F6 (7) sub-mech | A | n | Ea |
| F6(7)=S(32) | 8.75 E+18 | -1.18 | 28947 |
| F6(7)=S305) | 3.70 E+13 | 0.10 | 26039 |
| F6(7)=ZS(10)+ch3 | 9.25 E+13 | -0.07 | 28702 |
| S(32) =S(566) | 1.94 E+05 | 2.46 | 32051 |
| S(566) = c6h10-14d4m+ic3h5co | 7.71 E+10 | 0.92 | 21528 |
| S(566)=dipco-24d+c3h5-a | 9.45 E+13 | -0.2 | 18863 |
| ZS (6) = dipco-24d+c3h5-a | 1.28 E+17 | -0.6 | 31034 |
| S (305) =ZS (7) +co | 3.89 E+18 | -1.2 | 16546.1 |
| ZS(7) =ZS(8) | 8.19 E+07 | 1.68 | 26190 |
| ZS (7) = ZS(9) | 3.06 E+03 | 3 | 29223 |
| ZS (8) =isope+ic4h7 | 1.27 E+12 | 0.57 | 29288.7 |
| ZS (9) =isope+ic4h7 | 1.67 E+10 | 0.85 | 18770.1 |
| ZS (11)=ZS(12) | 3.30 E +42 | -7.90 | 42876 |
| ZS (12) = ZS(13) | 4.52 E+11 | 0.31 | 23268 |
| ZS (13) = c5h6-124d+c3h5-t+co | 6.32 E +10 | -0.25 | 57568 |

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

4.2.5 Changements apportés au mécanisme cinétique

La première version du mécanisme a montré un bon accord sur les résultats obtenus en réacteur parfaitement agité (JSR). En revanche, les simulations sur les mesures obtenues en machine à compression rapide (MCR) n'ont pas abouti à une concordance entre les résultats expérimentaux et modélisés. Afin d'améliorer cet écart, le domaine de validation du mécanisme a été étendu en ajoutant les réactions à basse température listées dans le **tableau 4.4**. Des modifications ont été nécessaires sur les paramètres cinétiques ayant un effet important sur le calcul de délais d'auto-inflammation. Le mécanisme a été validé à l'aide des mesures des délais d'auto-inflammation.

Le sous-mécanisme de la fenchone a été modifié comme suit :

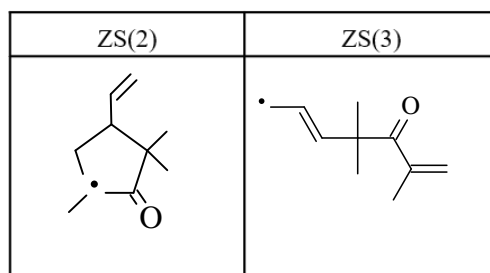
- Négliger toutes les réactions de métathèse produisant F1 et F2 en raison de leur énergie de liaison.
- Multiplication par 6 des facteurs pré-exponentiels des constantes de vitesse des réactions :
 - Fenchone + HO₂ ⇌ F3 + H₂O₂
 - Fenchone + HO₂ ⇌ F4 + H₂O₂

Ajout des réactions suivantes avec les mêmes constantes de vitesse que celles avec HO₂

- Fenchone + CH₃O₂ ⇌ F3 + CH₃O₂H
- Fenchone + CH₃O₂ ⇌ F4 + CH₃O₂H
- Multiplication par 10 de la constante de vitesse de : F3 ⇌ ZS (2).
- Diminution de l'énergie d'activation de la réaction : ZS(3) → c6h10-13d4m + CO + c3h5-t de 10 kcal.mol⁻¹.

On peut noter que, les réactions rajoutées a posteriori n'avaient pas d'effet dans le cas du JSR donc globalement, la version finale du mécanisme a permis de reproduire correctement les résultats expérimentaux dans le cas du réacteur parfaitement agité et la machine à compression rapide.

Les formules squelettiques des radicaux ZS(2) et ZS(3) sont les suivantes



Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

- Un sous mécanisme à basse température a été rajouté : cette modification a permis de prédire les délais les plus longs à la richesse $\varphi = 0,5$ et 1.

Listes des réactions qui prédisent les délais d'auto-inflammation à basse température

Tableau 4. 4:Liste des réactions les plus sensibles pour le calcul du délai d'auto-inflammation aux basses températures.

| Réactions | | | | | |
|-----------|----------------------------|-----------|-------|---------|--|
| 1. | F3(5)+o2 => R3O2 | 2.000E+12 | 0.0 | 0.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 2. | F4(3)+o2 => R4O2 | 2.000E+12 | 0.0 | 0.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 3. | F5(9)+o2 => R5O2 | 2.000E+12 | 0.0 | 0.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 4. | F6(7)+o2 => R6O2 | 2.000E+12 | 0.0 | 0.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 5. | R3O2 => F3(5)+o2 | 1.700E+16 | 0.0 | 28000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 6. | R4O2 => F4(3)+o2 | 1.700E+16 | 0.0 | 28000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 7. | R5O2 => F5(9)+o2 | 1.700E+16 | 0.0 | 28000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 8. | R6O2 => F6(7)+o2 | 1.700E+16 | 0.0 | 28000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 9. | F3(5)+o2 => OLEF+ho2 | 1.000E+11 | 0.0 | 5000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 10. | F4(3)+o2 => OLEF+ho2 | 1.000E+11 | 0.0 | 5000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 11. | R3O2 => OLEF+ho2 | 2.550E+16 | -1.22 | 32500.0 | Goldsmith et al., J.Phys.Chem.A 116(2012)3325-3346 10atm |
| 12. | R4O2 => OLEF+ho2 | 2.550E+16 | -1.22 | 32500.0 | Goldsmith et al., J.Phys.Chem.A 116(2012)3325-3346 10atm |
| 13. | R3O2 => QOOH | 2.000E+11 | 0.0 | 17000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 14. | R4O2 => QOOH | 2.000E+11 | 0.0 | 17000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 15. | R5O2 => QOOH | 2.000E+11 | 0.0 | 17000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 16. | R6O2 => QOOH | 2.000E+11 | 0.0 | 17000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 17. | QOOH => cyOX+oh | 5.000E+11 | 0.0 | 15000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 18. | QOOH+o2 => O2QOOH | 5.600E+12 | 0.0 | 0.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 19. | O2QOOH => HOOUOOH | 1.000E+11 | 0.0 | 17000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 20. | HOOUOOH => OUOOH+oh | 1.000E+09 | 0.0 | 7500.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 21. | OUOOH => OUO+oh | 8.400E+13 | 0.0 | 41521.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |
| 22. | OUO => 3co+ic4h7v+c3h5-t+h | 1.000E+13 | 0.0 | 15000.0 | adapted from Peters, CNF 2002 |

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

4.3 Principe de construction d'un mécanisme cinétique

Le mécanisme cinétique est constitué de plusieurs structures successives dont la première partie commence par C_0 et il contient les réactions relatives à la combustion de l'hydrogène.

La partie suivante concerne les C_1 : monoxyde de carbone, méthane, formaldéhyde et ainsi de suite jusqu'aux C_4 et les hydrocarbures complexes. Le sous mécanisme constitue la base dans laquelle s'ajoute le sous-mécanisme de l'espèce étudiée et celles des espèces qui sont formées quand le combustible se décompose.

La structure hiérarchique est illustrée sur la *figure 4.12*.

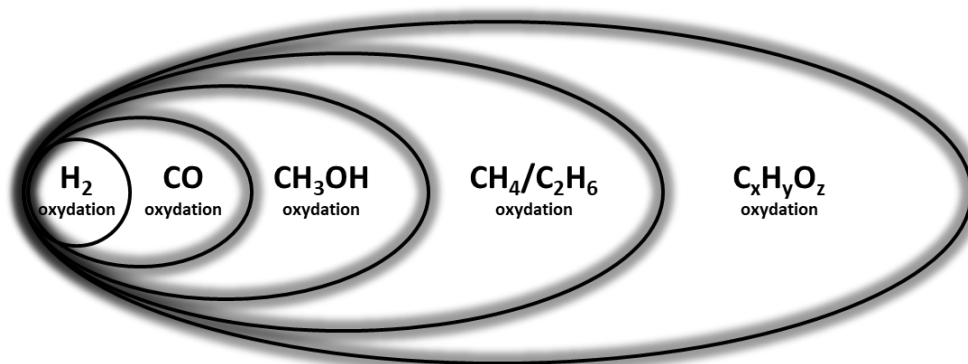


Figure 4. 14: Structure hiérarchique d'un mécanisme cinétique.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

4.4 Conclusion

Dans le cadre de cette étude, RMG nous a permis de générer un sous mécanisme pour l'oxydation de la fenchone, des paramètres cinétiques, thermodynamiques et les données de transport.

Les corrélations structure/ réactivité ont été utilisées pour estimer certaines constantes de vitesse. Le calcul des énergies de dissociation des liaisons (BDE) a permis de déterminer le schéma réactionnel le plus favorable pour la formation des radicaux et les données thermodynamiques ont été évaluées par la méthode d'additivité des groupes implémentée dans RMG. L'ensemble des réactions d'arrachement d'hydrogène et les réactions de β -scission constituent les voies principales de consommation de la fenchone.

Le modèle cinétique détaillé de l'oxydation de la fenchone nous a permis de reproduire convenablement les résultats expérimentaux et numériques. Cette validation est l'objet du chapitre qui suit.

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

Références du chapitre 4

- [83] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, et C. K. Westbrook, « A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation », *Combustion and Flame*, vol. 114, n° 1, p. 149-177, juill. 1998, doi: 10.1016/S0010-2180(97)00282-4.
- [84] « Griffiths, J. F. and J. A. Barnard (1995)., « Flame and Combustion », Routledge & CRC Press. »
- [85] M. S. Johnson et W. H. Green, « A Decision Tree Based Machine Learning Algorithm for Rate Estimation », Massachusetts Institute of Technology (77 Massachusetts Avenue, Cambridge, MA 02139, USA), DOE-MIT-0007982, nov. 2019. doi: 10.2172/1763640.
- [86] A. S. Tomlin, T. Turányi, et M. J. Pilling, « Chapter 4 Mathematical tools for the construction, investigation and reduction of combustion mechanisms », in *Comprehensive Chemical Kinetics*, vol. 35, Elsevier, 1997, p. 293-437. doi: 10.1016/S0069-8040(97)80019-2.
- [87] S. W. Benson et J. H. Buss, « Additivity Rules for the Estimation of Molecular Properties. Thermodynamic Properties », *The Journal of Chemical Physics*, vol. 29, n° 3, p. 546-572, sept. 1958, doi: 10.1063/1.1744539.
- [88] M. Liu *et al.*, « Reaction Mechanism Generator v3.0: Advances in Automatic Mechanism Generation », *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 61, n° 6, p. 2686-2696, juin 2021, doi: 10.1021/acs.jcim.0c01480.
- [89] C. W. Gao, J. W. Allen, W. H. Green, et R. H. West, « Reaction Mechanism Generator: Automatic construction of chemical kinetic mechanisms », *Computer Physics Communications*, vol. 203, p. 212-225, juin 2016, doi: 10.1016/j.cpc.2016.02.013.
- [90] L. S. Tee, S. Gotoh, et W. E. Stewart, « Molecular Parameters for Normal Fluids. Lennard-Jones 12-6 Potential », *Ind. Eng. Chem. Fund.*, vol. 5, n° 3, p. 356-363, août 1966, doi: 10.1021/i160019a011.
- [91] « ANSYS CHEMKIN 20.0, ANSYS Reaction Design 2022, (2022). »
- [92] « rmg:, <https://rmg.mit.edu/> ».
- [93] G. Dayma, S. Thion, Z. Serinyel, et P. Dagaut, « Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of cyclopentane and methylcyclopentane at atmospheric pressure », *Int. J. Chem. Kinet.*, vol. 52, n° 12, p. 943-956, déc. 2020, doi: 10.1002/kin.21412.
- [94] H. Wang, B. Zhang, S. Gong, L. Wang, X. Zhang, et G. Liu, « Experimental and modeling studies of quadricyclane and 2-ethylnorbornane pyrolysis from atmospheric to

Chapitre 4 : développement d'un mécanisme cinétique

- high pressure », *Combustion and Flame*, vol. 226, p. 163-181, avr. 2021, doi: 10.1016/j.combustflame.2020.11.042.
- [95] G. R. Magoon, H.-W. Wong, O. O. Oluwole, D. K. Lewis, N. M. Vandewiele, et K. M. Van Geem, « JP-10 combustion studied with shock tube experiments and modeled with automatic reaction mechanism generation », *Combustion and Flame*, vol. 162, n° 8, p. 3115-3129, août 2015, doi: 10.1016/j.combustflame.2015.02.010.
- [96] R. Sivaramakrishnan, J. V. Michael, et B. Ruscic, « High-temperature rate constants for $H/D + C_2H_6$ and C_3H_8 », *Int J of Chemical Kinetics*, vol. 44, n° 3, p. 194-205, mars 2012, doi: 10.1002/kin.20607.
- high pressure », *Combustion and Flame*, vol. 226, p. 163-181, avr. 2021, doi: 10.1016/j.combustflame.2020.11.042.
- [97] B. Sirjean, O. Herbinet, P.-A. Glaude, M. F. Ruiz-Lopez, et R. Fournet, « Theoretical Study of the Thermal Decomposition of a Jet Fuel Surrogate ». arXiv, 22 avril 2009. doi: 10.48550/arXiv.0904.3538.
- [98] « Mechanism and Rate Constants for the Decomposition of 1-Pentenyl Radicals ». [En ligne]. Disponible sur: <https://pubs.acs.org/doi/epdf/10.1021/jp058125j>
- [99] S. M. Handford-Styring et R. W. Walker, « Rate constants for the reaction of HO₂ radicals with cyclopentane and propane between 673 and 783 K », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 4, n° 4, p. 620-627, févr. 2002, doi: 10.1039/b108578f.

Chapitre V

Résultats et discussion

Chapitre 5 : Résultats et discussion

| | |
|---|------------|
| Chapitre 5 | 82 |
| 5.1 Etude en réacteur parfaitement agité | 83 |
| 5.1.1 Interprétation et discussion | 83 |
| 5.1.2 Analyse de voies réactionnelles | 90 |
| 5.2 Etude expérimentale en machine à compression rapide | 93 |
| 5.2.1 Modélisation et simulation des délais d'auto-inflammation..... | 99 |
| 5.2.2 Analyse de sensibilité sur l'auto-inflammation de la fenchone | 101 |
| 5.3 Conclusion | 103 |
| Références du chapitre 5 | 104 |

0

Chapitre 5

Ce chapitre est dédié aux résultats expérimentaux obtenus, il est structuré en deux parties.

Dans un premier temps, ce chapitre sera consacré à l'étude expérimentale menée dans un réacteur parfaitement agité. Ensuite, la deuxième partie de ce chapitre sera dédiée aux mesures de délais d'auto-inflammation en machine à compression rapide. Ces données sont comparées avec les prédictions issues du modèle cinétique présenté précédemment.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

5.1 Etude en réacteur parfaitement agité

5.1.1 Interprétation et discussion

Cette section présente un large éventail de conditions expérimentales réalisées à un temps de séjour moyen constant $\tau = 0,7$ s et à une pression constante de 10 atm. Trois conditions de richesse ont été étudiées, d'un milieu pauvre en combustible à un milieu riche en combustible ($\phi = 0,5-1-2$).

La fraction molaire de la fenchone en entrée du réacteur est fixée à $X_{\text{fenchone}} = 1000$ ppm pour l'ensemble des expériences et la gamme de température couvre 700 à 1180 K.

Plus de 30 espèces ont été détectées, dont des alcanes (C_1-C_3), des alcènes (C_2-C_5), des diènes (C_4-C_6), des oléfines cycliques, des aromatiques et des composés carbonylés.

Les profils des réactifs ainsi que ceux des espèces majoritaires seront présentés dans le corps du manuscrit. La *figure 5.1* illustre l'évolution de la fraction molaire de la fenchone en fonction de la température : la réactivité devient significative vers 800 K.

En outre, la conversion du combustible pour le mélange pauvre en combustible est sensiblement plus élevée que celle du mélange riche à une même température.

Comme illustré par les profils de fractions molaires, le combustible est consommé entre 800 et 1000 K. Le mécanisme cinétique développé dans le cadre de ce travail de thèse rend bien compte de l'impact de la température sur la réactivité pour le mélange pauvre et le mélange stœchiométrique, mais prédit une réactivité légèrement excessive entre 900 et 1050 K pour le mélange riche en combustible.

L'accord entre les données expérimentales et le modèle développé lors de ce travail semble être satisfaisant puisque la simulation permet de reproduire d'une manière raisonnable (c'est-à-dire dans l'incertitude expérimentale de 15%) les résultats expérimentaux obtenus.

Des observations peuvent être faites sur les trois conditions de richesse.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

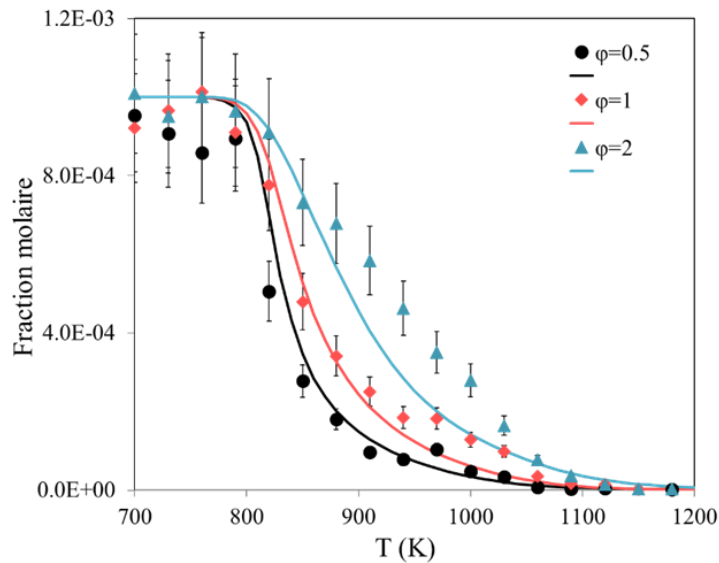


Figure 5. 1: Evolution de la fraction molaire de la fenchone en fonction de la température selon trois conditions de richesse différentes à $p = 10$ atm, $\tau = 0,7$ s, $X_{f,0} = 1000$ ppm.

Les *figures* (5.3), (5.4) et (5.5) représentent l'évolution des fractions molaires des espèces intermédiaires majeures : CH_4 , C_2H_4 , et CH_2O ont été quantifiés avec des fractions molaires maximales de 1000 ppm et 500 ppm pour CH_4 et C_2H_4 respectivement pour le mélange riche. Le profil de CH_4 est bien reproduit en milieu riche mais, au-delà de 1110 K, les fractions molaires expérimentales sont sous-estimées par le modèle. En milieu pauvre ainsi qu'en milieu stœchiométrique, ces profils expérimentaux de fraction molaire sont surestimés par le modèle, par contre à partir de 1050 K, ils sont sous-estimés.

Le profil de C_2H_4 est sous-estimé en milieu riche et stœchiométrique mais le modèle reproduit bien les données expérimentales entre 800 et 950 K. En revanche, elles sont sous-estimées entre 850 et 950 K et surestimées au-delà de 1000 K en milieu pauvre. La fraction molaire maximale de formaldéhyde est de l'ordre de 180 ppm pour tous les mélanges.

Pour le propène, en milieu pauvre, la simulation reproduit très bien le profil expérimental entre 800 et 950 K. Cependant, au-delà de 1000 K, ils sont sous-estimés. En milieu stœchiométrique et riche, les profils de propène sont sous-estimées par le modèle, sa fraction molaire maximale se situe à 100 ppm et 70 ppm à $\phi = 2$ et $\phi = 1$ respectivement. On peut noter également le profil de la méthacroléine, surestimé entre 800 et 1000 K pour tous les mélanges. Par contre, il est bien reproduit à partir de 1000 K. Le profil simulé de l'eau reproduit bien les données expérimentales en milieu riche et pauvre. Cependant, en milieu stœchiométrique, il est surestimé entre 800 K et 1000 K et sous-estimé au-delà de 1000 K.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

L'acétylène est sous-estimé à $\phi = 1$ et à $\phi = 0.5$ sa fraction molaire est d'environ 30 ppm et 10 ppm respectivement, par contre en milieu riche, son profil est bien simulé et sa fraction molaire maximale est d'environ 150 ppm. Concernant les espèces aromatiques, leur fractions molaires augmente en fonction de la richesse, la plus abondante étant le benzène : à $\phi = 2$ sa fraction molaire atteint presque 200 ppm, alors qu'elle n'est que de 20 ppm à $\phi = 0,5$.

D'après la **figure 5.2**, les fractions molaires de benzène sont sur-estimées en condition stœchiométrique mais sous-estimées à $\phi = 2$ quand $T > 1050$ K.

Le toluène et le xylène ont également été identifiés dans des proportions comparables, leurs fractions molaires étant plus élevées pour le mélange riche: moins de 10 ppm de styrène ont été détectés à $\phi = 2$ et ces 2 espèces n'apparaissent qu'à l'état de trace à $\phi = 0,5$ et 1.

De faibles quantités de plusieurs espèces cycliques (dans les environs de 6 ppm) ont également été observées, telles que le cyclopentadiène et les deux isomères de méthyl-cyclopentadiène..

Enfin, parmi les intermédiaires oxygénés, l'acétone (C_3H_6O), l'acroléine (C_3H_4O), la méthylvinylcétone : MVK (C_4H_6O) et la méthacroléine (C_4H_6O) ont également été quantifiés, leurs fractions molaires étant plus élevées en milieu pauvre.

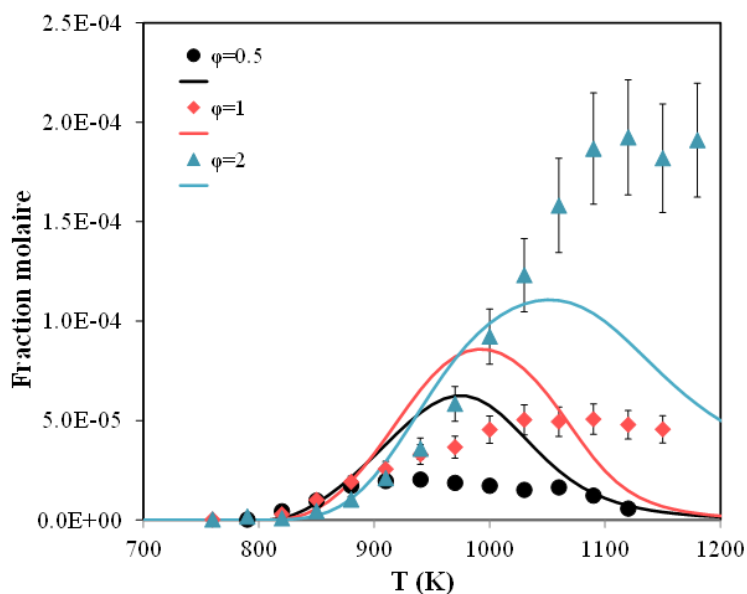


Figure 5. 2: Evolution des fractions molaires du benzène en fonction de la température pour trois conditions de richesse ($\phi = 0,5-1-2$), à $p = 10$ atm, $\tau = 0,7$ s.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

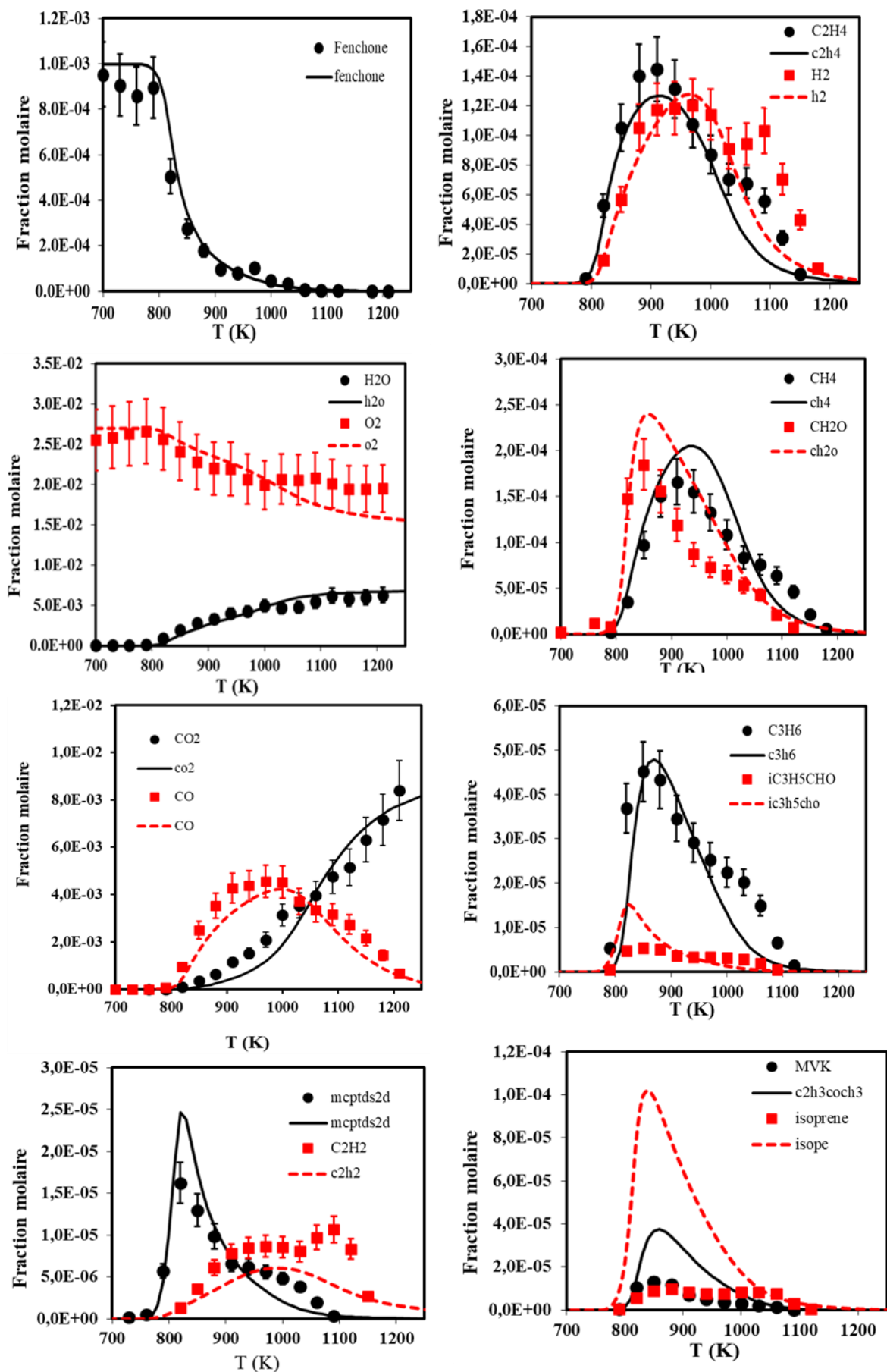


Figure 5.3: Résultats obtenus en milieu pauvre $\phi = 0,5$ en réacteur parfaitement agité à 10 atm, $\tau = 0,7$ s, pour 1000 ppm de fenchone.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

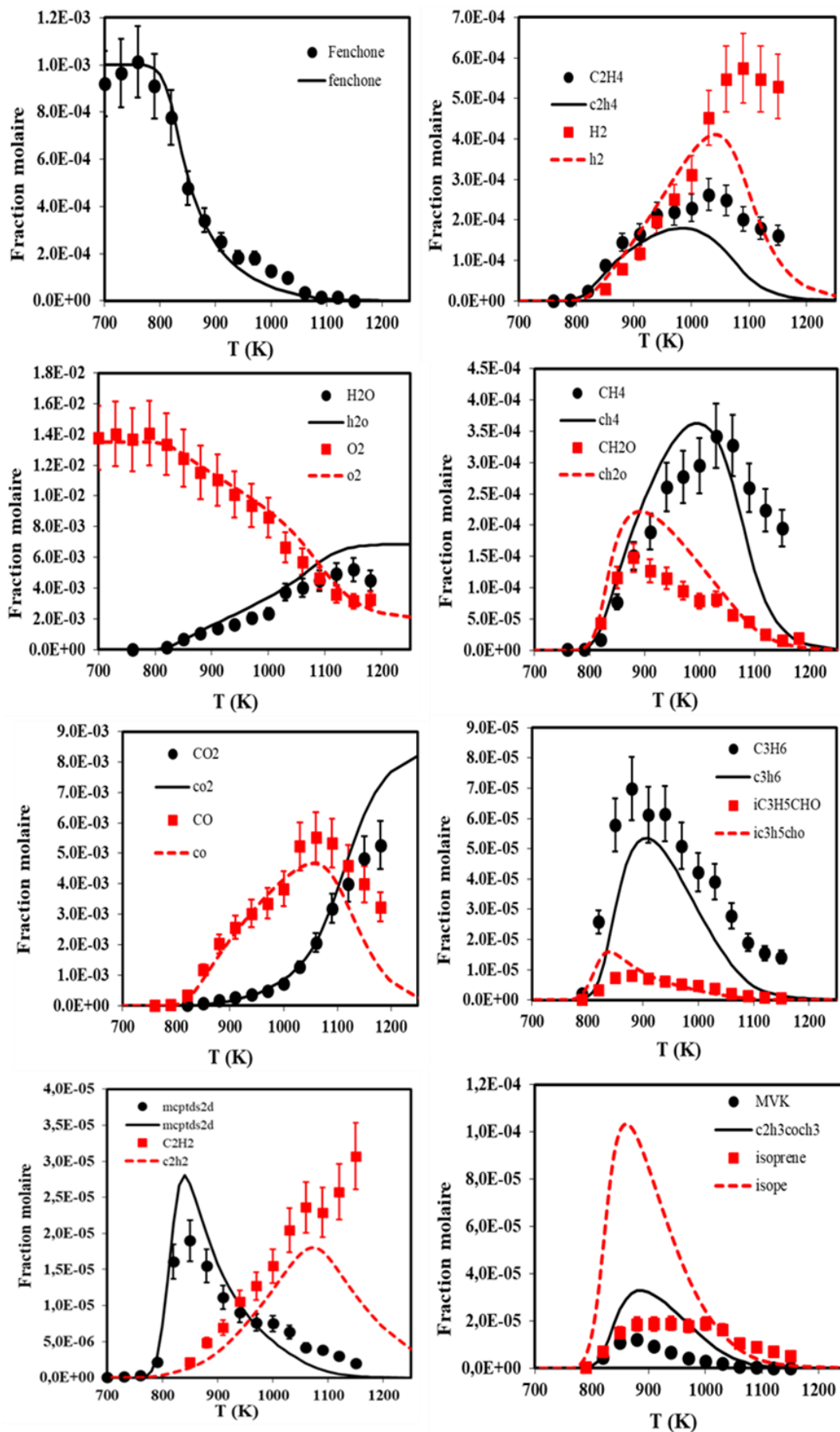


Figure 5. 4: Résultats obtenus en milieu stœchiométrique $\phi = 1$ en réacteur parfaitement agité à 10 atm, $\tau = 0,7$ s, pour 1000 ppm de fenchone.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

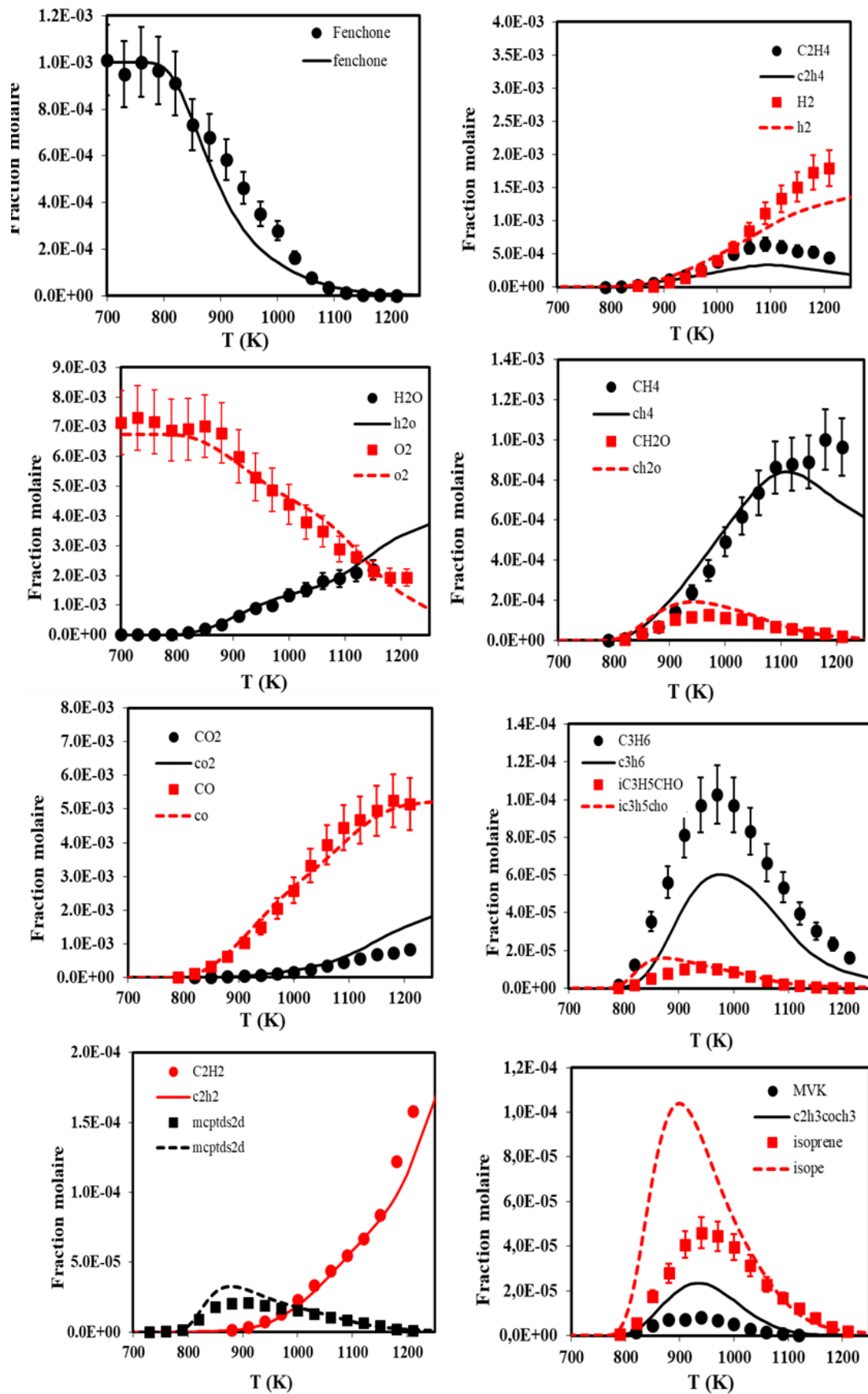


Figure 5. 5: Résultats obtenus en milieu riche $\phi = 2$ en réacteur parfaitement agité à 10 atm, $\tau = 0,7$ s, pour 1000 ppm de fenchone.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

Le mécanisme cinétique reproduit assez bien le profil du carburant ainsi que de la formation et de la consommation des différents intermédiaires. Expérimentalement, on peut également observer que la réactivité diminue légèrement (ou, du moins, ne continue pas à augmenter avec la température) sur la plage de température 900-1050 K. Cette diminution est de plus en plus prononcée lorsque la richesse augmente, Elle peut être également attribuée à l'accumulation d'intermédiaires stables lourds qui n'ont pas été détectés expérimentalement. Cette diminution de la réactivité n'est pas vraiment capturée par le modèle et une prédiction plus précise de ce phénomène constituerait une amélioration significative de la compréhension de l'oxydation de la fenchone à haute température. Néanmoins, compte tenu du bon accord observé entre les simulations et les expériences à basse température, une analyse des voies réactionnelles a été réalisée dans des conditions stœchiométriques et à $T = 850$ K (température à laquelle la moitié de la fenchone est consommée) afin d'élucider les principales voies de consommation de la fenchone dans ces conditions, Les résultats de cette analyse des voies réactionnelles sont présentés dans la *figure 5.6*.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

5.1.2 Analyse de voies réactionnelles

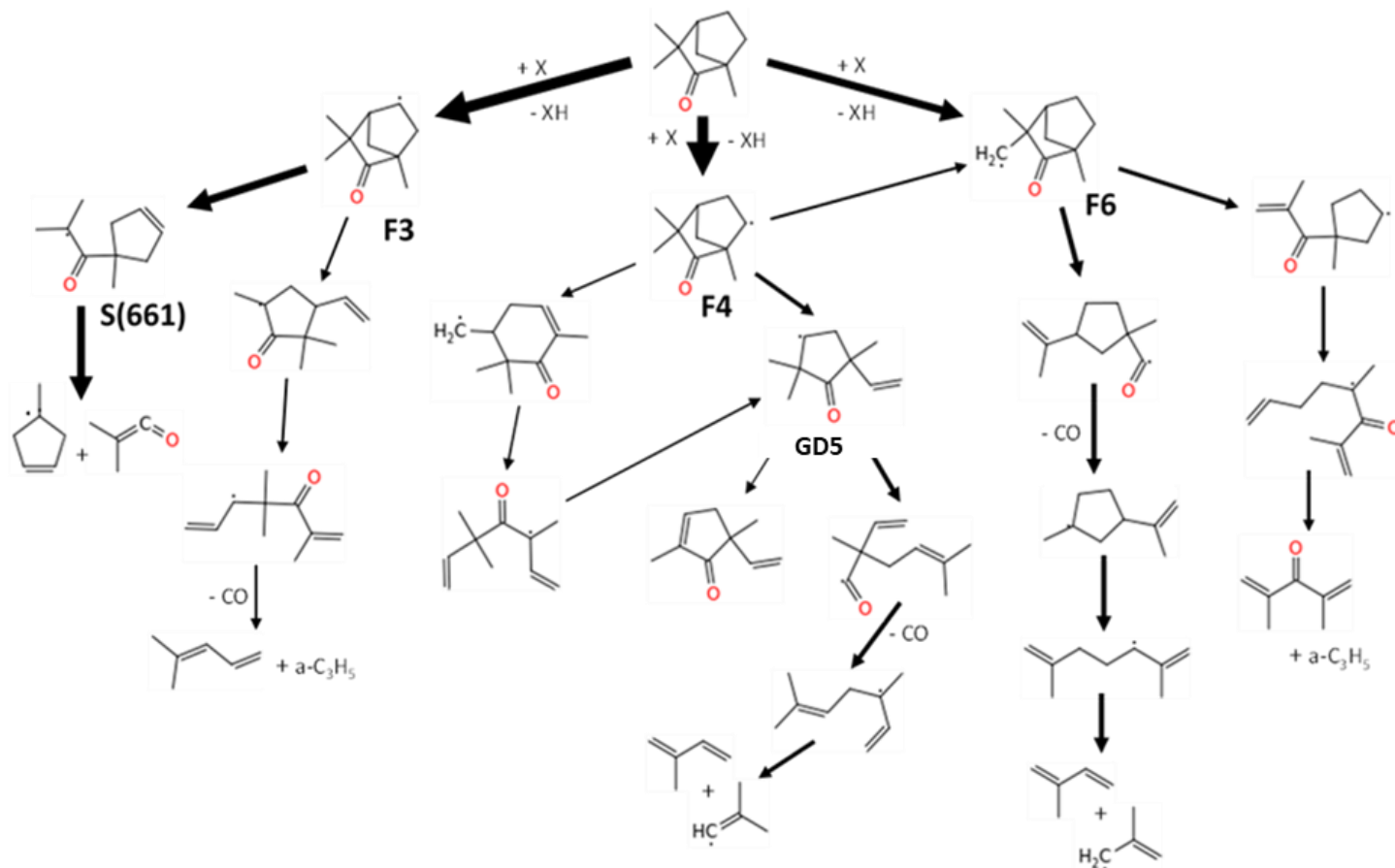


Figure 5. 6 : Analyse des voies d'oxydation de la fenchone à $\varphi = 1$, $p = 10$ atm, $\tau = 0,7$ s et $T = 850$ K (L'épaisseur des flèches indique l'intensité du flux de carbone au sein du réseau réactionnel, c'est-à-dire la vitesse volumique molaire de conversion d'une espèce en une espèce adjacente du réseau).

Comme le montre la **figure 5.6**, la fenchone est consommée principalement par des réactions d'arrachement d'hydrogène par le radical OH. Bien qu'il soit moins formé que les radicaux F3 et F4, F6 est le troisième radical primaire le plus important dans cette analyse. La formation des radicaux F5, F1 et F2 est moins importante (9%, 5% et 4% respectivement).

Les voies de consommation des radicaux F3, F4, F6 sont les suivantes :

Chapitre 5 : Résultats et discussion

- F3- Près des trois quarts de F3 se décomposent en 4-isobuténoxy-4-méthyl-1-cyclopentène, S(661), qui réagit complètement pour donner un radical méthylcyclopentényle et ouvre la voie à la formation de benzène, ce qui est l'objet de la discussion dans le paragraphe suivant. Le quart restant conduit au radical allyle et au 4-méthylpenta-1,3-diène (qui n'a pas été observé expérimentalement) par une succession de réactions. La β -scission C–C ouvrant le pont sur le cycle à six chaînons et donnant un radical d'une cyclohexanone ramifiée, semble être négligeable dans ces conditions.
- F4- Un quart de F4 s'isomérisé en F6, tandis que plus d'un tiers produit GD5(C=CC1(C)C[CH]C(C)(C)C(=O)1). Ce dernier est également formé par cyclisation d'un radical obtenu par l'ouverture du cycle à 6 chaînons. Un quart du GD5 donne une cyclopenténone ramifiée (5-éthényl-2,5-diméthylcyclopent-2-en-1-one), le reste produisant de l'isoprène et le radical isobutényle vinylique après ouverture du cycle et décarbonylation. Ce radical isobutényle est responsable de la formation de l'acétone.
Deux autres réactions de β -scission C–C ont été envisagées pour consommer F4, mais il s'avère qu'elles sont toutes les deux négligeables dans ces conditions.
- F6- Les deux voies consommant du F6 sont similaires en terme de flux : l'une donne de l'isoprène après décarbonylation et ouverture de cycle, tandis que l'autre produit de la diisopropénylcétone qui n'a pas été observé expérimentalement.
Une troisième β -scission C–C a également été envisagée pour F6 produisant des radicaux CH₃, mais s'avère être négligeable en raison de son énergie d'activation élevée, liée à l'énergie de la liaison rompue correspondante.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

L'étude des voies de formation du benzène permet d'éclairer les différentes étapes de conversion des intermédiaires connexes. Une analyse a été réalisée à $\varphi = 1$ et $T = 950$ K, révélant que le benzène est principalement produit par les réactions des radicaux méthyl cyclopentényles, des méthylcyclopentadiènes, des radicaux méthyl cyclopentadiényles et du fulvène. La **figure 5.7** indique que le benzène provient principalement du radical F3 par la formation de radicaux méthyl cyclopentényle. Le mécanisme cinétique a été modifié de manière significative, afin de prendre en compte les récents calculs de la constante de vitesse de $\text{CH}_3 + \text{C}_5\text{H}_5$ par Krashnoukov et al. [100] mais des améliorations sont encore nécessaires pour mieux représenter l'accumulation du benzène dans ces conditions, étant donné la diversité des intermédiaires en C_6 et les voies de formation et de la consommation du benzène correspondantes[101].

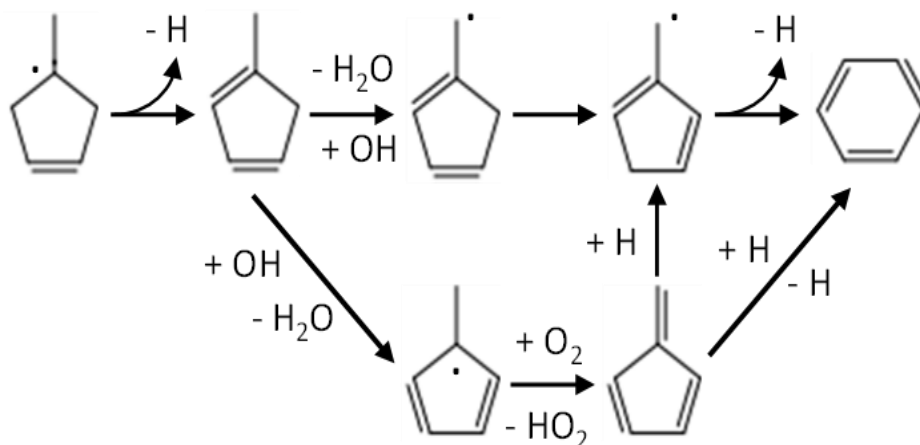


Figure 5. 7 : Voies de formation du benzène à $p = 10$ atm et $\tau = 0,7$ s.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

5.2 Etude expérimentale en machine à compression rapide

En complément de l'étude réalisée en réacteur parfaitement agité, nous avons réalisé des expériences en machine à compression rapide (MCR) au laboratoire PRISME, afin d'étudier les délais d'auto-inflammation qui sont des observables importants pour le fonctionnement des moteurs à allumage commandé (prédiction du cliquetis). Le **tableau 5.1** résume la composition des mélanges réactifs pour les deux conditions de richesses en fonction de la composition des inertes. Comme on peut le constater, la concentration de la fenchone est plus élevée qu'en JSR, permettant d'élargir la validité du schéma cinétique développé.

Les conditions expérimentales en MCR sont résumées dans le **tableau 5.2, 5.3 et 5.4**.

Sur l'ensemble des expériences, un mélange carburant/O₂/inertes (N₂ et/ou Ar) a été utilisé, à différentes richesses ($\phi = 0,5$ et 1) et à une pression en fin de compression d'environ 40 bar, les diluants permettent de modifier la capacité calorifique du mélange et de varier la température à la fin de la compression.

Les conditions expérimentales telles que : la température, la pression et la présence des diluants (Ar, N₂) dans le mélange ont un effet important sur les délais d'auto-inflammation.

Les résultats obtenus dans cette thèse constituent la première étude dans la littérature des délais d'auto-inflammation des mélanges réactifs de fenchone.

Tableau 5. 1: Compositions des mélanges utilisés pour les expériences en MCR.

| Richesse | $\phi=0,5$ | | | |
|-----------------------------|--|----------------------------|-----------------|----------------------------|
| % inertes | X _{C₁₀H₁₆O} | X _{O₂} | X _{Ar} | X _{N₂} |
| 60%Ar - 40%N ₂ | 0,0077 | 0,2083 | 0,4703 | 0,3135 |
| 70%Ar - 30%N ₂ | 0,0077 | 0,2083 | 0,5487 | 0,2351 |
| 30%Ar - 70%N ₂ | 0,0077 | 0,2083 | 0,2351 | 0,5487 |
| 80%Ar - 20%N ₂ | 0,0077 | 0,2083 | 0,6271 | 0,1567 |
| Richesse | $\phi=1$ | | | |
| % inertes | X _{C₁₀H₁₆O} | X _{O₂} | X _{Ar} | X _{N₂} |
| 50% Ar - 50% N ₂ | 0,0153 | 0,2067 | 0,3889 | 0,3889 |
| 70% Ar - 30%N ₂ | 0,0153 | 0,2067 | 0,5445 | 0,2334 |
| 30% Ar - 70%N ₂ | 0,0153 | 0,2067 | 0,2334 | 0,5445 |

Chapitre 5 : Résultats et discussion

▪ Effet de la richesse

L'évolution du délai d'auto-inflammation en fonction de la température de fin de compression est présentée sur la **figure 5.8**, sur l'ensemble des conditions de richesse ($\phi=0,5$ et 1).

Les délais d'auto-inflammation diminuent quand la richesse augmente. On peut constater expérimentalement que les délais d'auto-inflammation mesurés en mélange stœchiométrique sont plus courts que ceux mesurés à la richesse $\phi = 0,5$. Ceci peut être attribué non-seulement à la quantité du carburant injecté (plus la quantité de la fenchone est importante dans le mélange plus le délai est court dans le cadre de notre étude on s'est arrêté à $\phi = 1$. En effet des essais ont été réalisés à $\phi = 2$ et les résultats obtenus ont montré l'apparition du phénomène de condensation dans le réservoir. Cette observation a fait que les délais mesurés ne convenaient pas aux conditions opératoires.) et à la réactivité de la fenchone durant la compression.

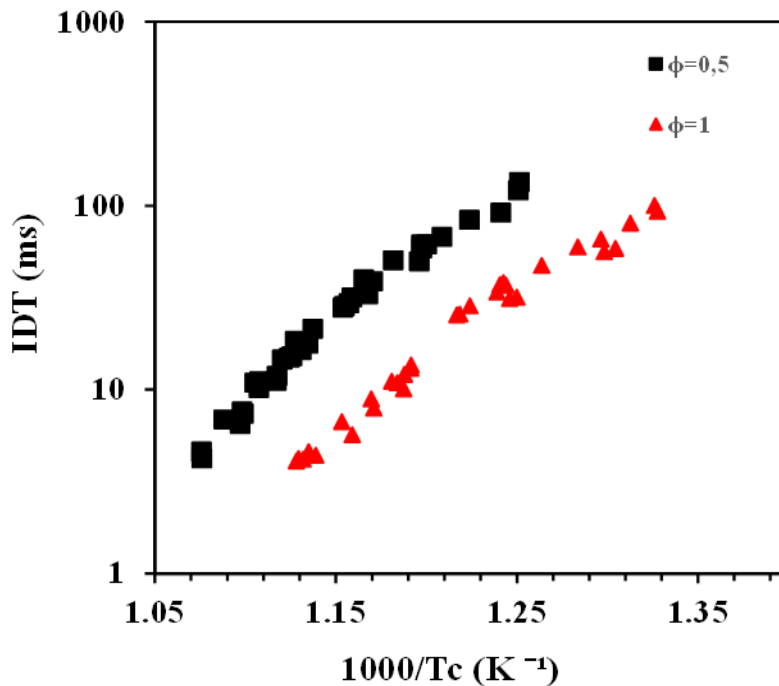


Figure 5. 8: Effet de la richesse sur l'évolution des délais d'auto-inflammation.

Les délais d'auto-inflammation mesurés de la fenchone, pour les deux conditions de richesse sont résumés dans les tableaux suivants :

Chapitre 5 : Résultats et discussion

- 35 expériences ont été réalisées sur le mélange pauvre $\varphi = 0,5$, la gamme de température étudiée s'étendait de 792 K à 930 K, les *tableaux 5.2 et 5.3* montrent que la majorité des délais mesurés étaient inférieurs à 100 ms et répétables à 1 ms près.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

Tableau 5. 2: Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en machine à compression rapide pour $\varphi = 0,5$, $p_c = 40$ bar, diluant (Ar =30%-N₂=70 %), (Ar =60%-N₂=40 %).

| Diluant Ar =30%-N₂=70 % | | | | |
|---|--------------------------|----------------------------|--------------------------|-----------------|
| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | IDT (ms) |
| 2,1 | 358,7 | 38,4 | 792,57 | 134,8 |
| 2,2 | 358,5 | 40 | 792,93 | 121,4 |
| 2,2 | 364 | 39,05 | 799 | 91,8 |
| 2,2 | 369,5 | 39,25 | 810,29 | 83,6 |
| 2,2 | 374 | 39,40 | 820,4 | 67,78 |
| 2,2 | 379,3 | 38,52 | 827,9 | 58,59 |
| 2,2 | 379,3 | 38,45 | 826 | 61,59 |
| 2,2 | 379,4 | 38,83 | 828,02 | 61,48 |
| 2,2 | 384,7 | 39,07 | 838,9 | 49,89 |
| 2,2 | 384,5 | 38,89 | 838,04 | 50,5 |
| Diluant Ar=60%-N₂= 40%. | | | | |
| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | IDT (ms) |
| 2 | 355,9 | 40,46 | 858 | 39,7 |
| 2 | 355,8 | 39,8 | 854 | 38,8 |
| 2 | 360,6 | 39,58 | 863 | 31,7 |
| 2 | 375,3 | 38,4 | 886 | 18,41 |
| 2 | 375,2 | 38,95 | 886 | 16,82 |
| 2 | 370,4 | 40,1 | 881 | 17,81 |
| 2 | 370,4 | 39,8 | 879 | 21,38 |
| 2 | 365,1 | 39,59 | 866 | 27,9 |
| 2 | 365,2 | 39,45 | 866 | 28,4 |
| 2 | 367,6 | 38,06 | 864 | 29,5 |

Chapitre 5 : Résultats et discussion

Tableau 5. 3: Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en machine à compression rapide à $\phi = 0,5$, $p_c = 40$ bar, diluant (Ar =70%-N₂=30 %),(Ar =80%-N₂=20 %).

| Diluant 70% Ar - 30% N₂ | | | | |
|--|--------------------------|----------------------------|--------------------------|-----------------|
| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | IDT (ms) |
| 2 | 367,8 | 39,19 | 892 | 14,58 |
| 2 | 362,4 | 39,6 | 888 | 15,19 |
| 2 | 362,1 | 39,07 | 884 | 16,37 |
| 2 | 365,9 | 38,59 | 889,5 | 14,88 |
| 2 | 366,6 | 39,2 | 895,24 | 11,16 |
| 2 | 366 | 39,38 | 894,88 | 11,88 |
| 2 | 370,4 | 39,4 | 903,84 | 10,18 |
| 2 | 370,3 | 39,49 | 904,84 | 10,89 |
| 2 | 370,6 | 39,32 | 902,8 | 11,08 |
| Diluant 80% Ar - 20 % N₂ | | | | |
| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | IDT (ms) |
| 1,9 | 36 | 39,42 | 911,6 | 6,49 |
| 1,9 | 362,6 | 39,4 | 910 | 7,41 |
| 1,9 | 362,6 | 38,98 | 910,59 | 7,59 |
| 1,9 | 367 | 38,84 | 919,10 | 6,87 |
| 1,9 | 370,9 | 40,02 | 929,73 | 4,59 |
| 1,9 | 371,5 | 39,78 | 929,4 | 4,22 |

- Pour le mélange stœchiométrique, 32 tirs ont été réalisés, le **tableau 5.4** présente les essais réalisés sur une gamme de températures allant de 754 K à 878 K avec $P_c = 40$ bar.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

Tableau 5. 4: Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en machine à compression rapide à $\phi = 1$, $p_c = 40$ bar, diluant (Ar =30%-N₂=70 %), (Ar =50%-N₂=50 %), (Ar =70%-N₂=30 %).

| Diluant Ar=30%-N₂= 70 %. | | | | |
|--|--------------------------|----------------------------|--------------------------|-----------------|
| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | IDT (ms) |
| 2,2 | 359,5 | 39,44 | 754,14 | 100,41 |
| 2,2 | 360 | 39,77 | 753,17 | 93,19 |
| 2,2 | 365 | 39,24 | 761,8 | 80,317 |
| 2,2 | 370,7 | 39,84 | 771,39 | 65,887 |
| 2,2 | 371,4 | 39,05 | 766,6 | 58,63 |
| 2,2 | 371 | 40,07 | 770,29 | 56,39 |
| 2,2 | 377 | 39,64 | 779,07 | 59,69 |
| 2,2 | 383,1 | 40,18 | 791,4 | 47,39 |
| 2,2 | 388,5 | 38,67 | 800,07 | 31,89 |
| 2,2 | 389,1 | 39,31 | 802,5 | 31,29 |
| Diluant Ar=50%-N₂= 50 %. | | | | |
| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | IDT (ms) |
| 2 | 370,4 | 37,77 | 807 | 33,87 |
| 2 | 370,1 | 38,63 | 806 | 37,29 |
| 2 | 369,9 | 38,97 | 804 | 37,5 |
| 2,1 | 370,4 | 39,2 | 804 | 38,08 |
| 2,1 | 370,4 | 39,95 | 803,9 | 36,98 |
| 2,1 | 377,5 | 39,9 | 816,9 | 28,52 |
| 2,1 | 381 | 39,57 | 821,8 | 25,48 |
| 2,1 | 380,8 | 39,4 | 820,8 | 25,78 |
| Diluant Ar=70%-N₂= 30 %. | | | | |
| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | IDT (ms) |
| 2 | 380,8 | 40,2 | 844,6 | 10,89 |
| 2 | 371 | 39,37 | 846,8 | 11,08 |
| 2 | 370,1 | 39,38 | 842,2 | 10,1 |
| 2 | 369,6 | 39,5 | 841,9 | 12,11 |
| 2 | 369,5 | 39,14 | 839,2 | 13,59 |
| 2,1 | 391,7 | 40,45 | 881 | 4,59 |
| 2,1 | 391,6 | 40,9 | 883,46 | 4,17 |
| 2,1 | 387,3 | 41,49 | 878,16 | 4,4 |

Chapitre 5 : Résultats et discussion

5.2.1 Modélisation et simulation des délais d'auto-inflammation

Les délais d'auto-inflammation ont été simulés à l'aide du modèle réacteur homogène du package Chemkin Pro 2022[91]. Le modèle de réacteur homogène fermé a été utilisé pour les simulations de la machine à compression rapide, les profils temporels de volume étant déterminés à partir des tests réalisés sur des mélanges non-réactifs ces derniers ont été réalisés sous deux conditions de richesse : $\phi = 0,5$ et $\phi = 1$.

Plusieurs mélanges ont été préparés pour ces deux conditions en utilisant les différentes compositions des diluants résumés dans le tableau suivant :

Tableau 5. 5: Composition des diluants à $\phi = 0,5$ et $\phi = 1$.

| Richesse | 0,5 | 1 |
|--------------------------|--|---------------------------|
| Composition des diluants | 80% Ar/20%N ₂ 30% Ar/70%N ₂ | 20% Ar/80% N ₂ |

Un exemple qui montre une comparaison entre l'étude expérimentale et la simulation des profils de volume pour des mélanges non réactifs.

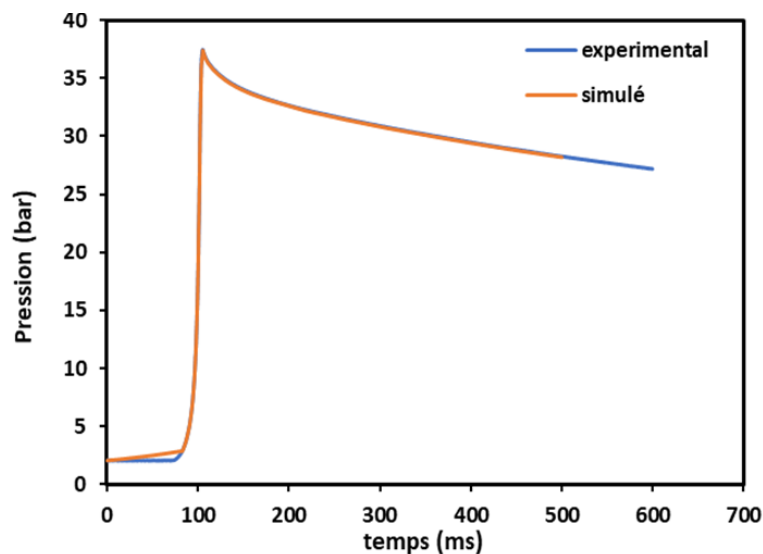


Figure 5. 9: Comparaison entre les profils de pression expérimentaux avec ceux obtenus par simulation pour le mélange non-réactif (fenchone/Ar 0,3 - N₂ 0,7), $\phi = 0,5$, $T_0 = 96,5$ °C et $P_0 = 2,059$ bar.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

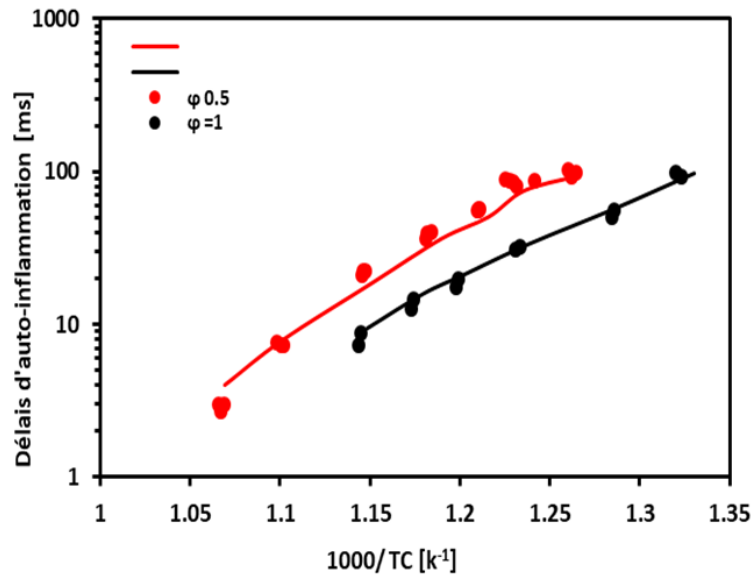


Figure 5. 10: Délai d'auto-inflammation des mélanges fenchone/ O_2 /diluant à la richesse 0,5 et 1.

La *figure 5.10* représente les résultats expérimentaux et de modélisation aux deux richesses $\phi = 0,5$ et 1 pour les mélanges fenchone/ O_2 /diluants. Les conditions expérimentales utilisées au cours de cette thèse pour les mélanges réactifs et non réactifs sont présentées en détail en *annexe 5.2*.

Pour les deux conditions, les délais d'auto-inflammation diminuent quand la température augmente. Sur la base des modifications effectuées, le mécanisme modifié reproduit les délais expérimentaux mesurés. On peut noter également que les délais mesurés à la richesse $\phi = 1$ sont plus courts que ceux mesurés à $\phi = 0,5$, comme expliqué précédemment, ceci peut être dû à la quantité du carburant et à la réactivité de la fenchone au cours de la compression, en conclusion, l'effet de la richesse sur les délais est bien reproduit par le mécanisme.

Dans l'ensemble, à $\phi = 0,5$ et à $\phi = 1$, les délais sont bien reproduits, les modifications apportées et le développement d'un sous-mécanisme de basse température ont un effet important sur l'amélioration des délais d'auto-inflammation.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

5.2.2 Analyse de sensibilité sur l'auto-inflammation de la fenchone

Afin d'identifier les réactions les plus sensibles pour la prédiction des délais d'auto-inflammation, une analyse de sensibilité a été réalisée dans le cas d'un mélange stœchiométrique de fenchone/O₂/diluant à $T_c = 875$ K et $p_c = 40$ bar.

Cette analyse (**Figure 5.11**) a été effectuée au moment où la consommation du carburant était de 20%.

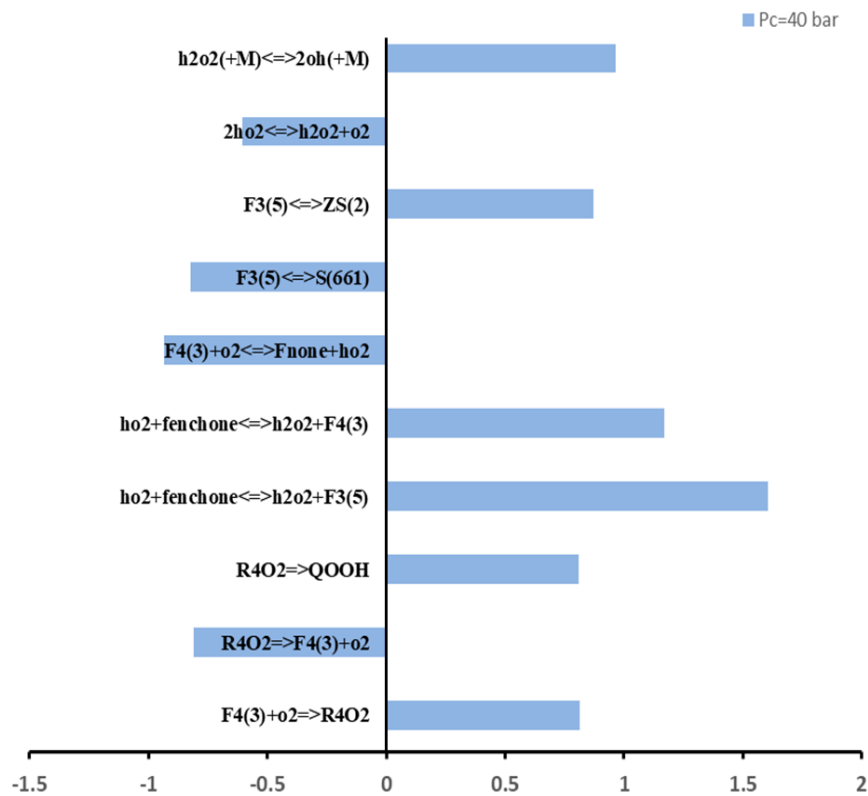


Figure 5. 11: Analyse de sensibilité sur OH durant l'auto-inflammation du mélange stœchiométrique fenchone/O₂/diluant, $T_c = 875$ K, $p_c = 40$ bar, à 20% de consommation de fuel.

Chapitre 5 : Résultats et discussion

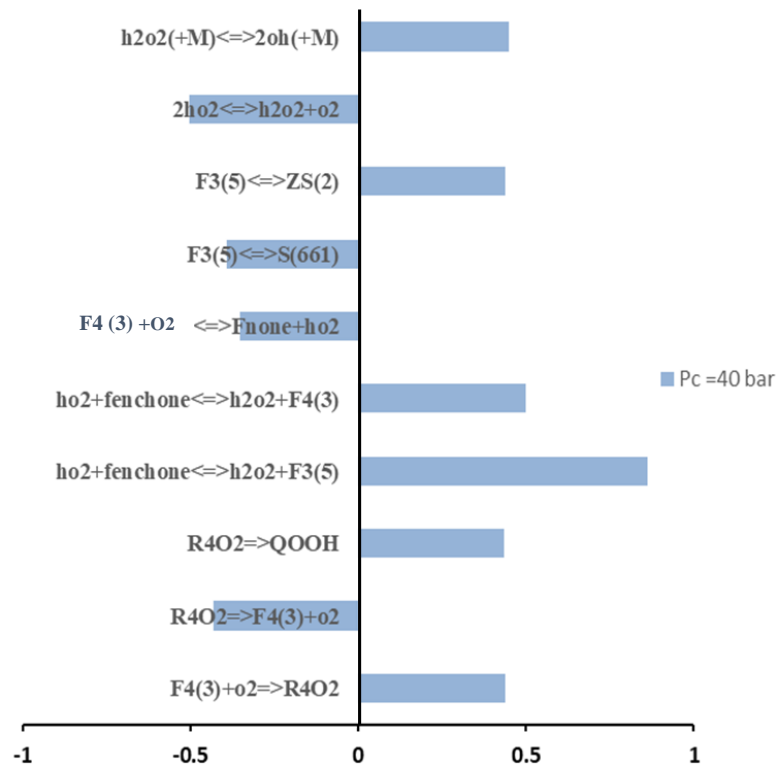
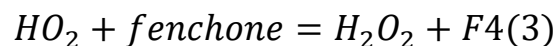
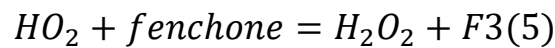


Figure 5. 12 : Analyse de sensibilité sur HO₂ durant l’auto-inflammation du mélange stœchiométrique fenchone/O₂/diluent, $T_c = 875$ K, $P_c = 40$ bars, à 20% de consommation de carburant.

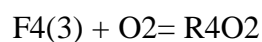
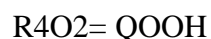
Les *figures 5.11 et 5.12* montrent que la consommation de la fenchone se déroule principalement par les réactions :



Ces réactions ont une grande influence sur les délais d’auto-inflammation calculées, elles engendrent les radicaux F3 et F4 et produisent du H₂O₂ dont la décomposition donne 2 radicaux OH, ces réactions sont en faveur de la réactivité. Leurs constantes de vitesse ont été générées par RMG, après modification du mécanisme leur coefficient a été multiplié par 6.

La réaction F4(3) + O₂ = Fnone + HO₂ est très sensible parce qu’elle a un effet inhibiteur sur ces conditions. La structure de Fnone est présentée en *annexe 4.1*.

En revanche, les réactions ajoutées en basse température ont une sensibilité sur OH et HO₂, notamment :



Chapitre 5 : Résultats et discussion

5.3 Conclusion

Dans ce présent travail, dans un premier temps l'oxydation de la fenchone a été étudiée en réacteur auto-agité par jets gazeux, un mécanisme cinétique a été développé principalement en utilisant le site web RMG et des analogies structure/réactivité complémentaires avec des hydrocarbures similaires disponibles dans la littérature.

Trois conditions de richesse ont été testées dans le cadre de notre étude afin d'évaluer la réactivité de la fenchone. En termes de conversion du combustible, le mélange riche en combustible s'est avéré être le moins réactif, et c'est aussi celui qui a produit le plus de benzène. Les analyses des voies réactionnelles ont montré que la formation de benzène est étroitement liée à la chimie des radicaux méthyl-cyclopentényles, des isomères du méthyl cyclopentadiène, des radicaux méthyl cyclopentadiényles et du fulvène. Outre le benzène, le toluène ainsi que des traces de styrène ont été identifiés comme espèces aromatiques.

Parmi les polluants oxygénés potentiels, on a observé la formation d'acroléine, méthacroléine et Acétaldéhyde. Globalement, le mécanisme cinétique a montré un bon accord avec nos données expérimentales et a permis d'identifier les voies de réaction sous-jacentes.

Dans la deuxième partie de ce travail, des tests ont été réalisés en machine à compression rapide et ont permis d'évaluer les délais d'auto-inflammation des différents mélange étudiés en fonctions des conditions expérimentales (la richesse, la composition des diluants, la température et la pression en fin de compression T_c, p_c).

Les résultats expérimentaux obtenus nous ont permis de déterminer l'effet de la richesse et la température sur les délais d'auto-inflammation, faisant apparaître une évolution monotone avec la température (bien que non parfaitement Arrhenius) impliquant la transition vers un régime d'oxydation de basse température).

Globalement, le mécanisme modifié prédit correctement les délais mesurés aux deux richesses ($\phi = 0,5$ et 1).

Chapitre 5 : Résultats et discussion

Références du chapitre 5

- [100] V. S. Krasnoukhov, D. P. Porfiriev, I. P. Zavershinskiy, V. N. Azyazov, et A. M. Mebel, « Kinetics of the $\text{CH}_3 + \text{C}_5\text{H}_5$ Reaction: A Theoretical Study », *J. Phys. Chem. A*, vol. 121, n° 48, p. 9191-9200, déc. 2017, doi: 10.1021/acs.jpca.7b09873.
- [101] N. Hansen, B. Yang, W. Li, P. R. Westmoreland, P. Oßwald, et K. Kohse-Höinghaus, « Fuel-structure dependence of benzene formation processes in premixed flames fueled by C_6H_{12} isomers », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, n° 1, p. 585-592, 2011, doi: 10.1016/j.proci.2010.05.056.

Conclusion et perspectives

Conclusion et perspectives

Ce travail représente la première étude de la cinétique d'oxydation de la fenchone, un terpène cyclique issu des huiles essentielles de fenouil, peut contribuer à l'amélioration de plusieurs propriétés des carburants automobiles. L'augmentation de la densité énergétique des carburants constitue un moyen potentiel de réduire les émissions spécifiques de CO₂ à l'échappement.

Cette thèse est le résultat de trois années de travaux de recherches menées à ICARE-CNRS d'Orléans et financés par le Labex CAPRYSES (ANR- 11-LABX-006-01).

Dans le cadre de ce projet, le présent travail a mis en évidence les résultats obtenus sur l'étude expérimentale et numérique de la cinétique d'oxydation de la fenchone.

La revue bibliographique nous a rapporté des informations sur les terpènes polycycliques en fonction de leurs propriétés physico-chimiques, la fenchone est le carburant choisi en raison de son pouvoir calorifique élevé ainsi que son indice d'octane (RON) de l'ordre de 93.

Deux études expérimentales ont été menées sur l'oxydation de la fenchone, tout d'abord, nous avons étudié la chimie d'oxydation de la fenchone en réacteur auto-agité à jet gazeux.

Trois conditions de richesses ($\varphi = 0.5-1-2$) ont été choisies sur l'ensemble des expériences pour pouvoir évaluer la réactivité de la fenchone pour une pression de 10 atm.

Grâce aux analyses en GC et FTIR, il a été possible d'identifier et quantifier plus de trente espèces identifiées expérimentalement dont les espèces majoritaires CO, CO₂, H₂O, CH₄, C₂H₄, le propène et le formaldéhyde. En termes de conversion du combustible, nous avons pu constater que le mélange riche en combustible s'est avéré être le moins réactif, et c'est également celui qui a produit le plus de benzène.

Les analyses des voies de réaction ont montré que la formation de benzène est étroitement liée à la chimie des radicaux méthylcyclopentényle, des isomères méthylcyclopentadiène, des radicaux méthylcyclopentadiène et du fulvène. Outre le benzène, le toluène et des traces de styrène ont été identifiés comme des espèces aromatiques. Parmi les polluants oxygénés potentiels, on a pu observer la formation d'acroléine et de la méthacroléine. Dans l'ensemble, le mécanisme cinétique a montré un bon accord avec les données expérimentales.

Ensuite, des essais ont été réalisés en machine à compression rapide et ont permis d'évaluer les délais d'auto-inflammation des différents mélanges étudiés en fonction des conditions expérimentales (la richesse, la composition des diluants, la température et la pression en fin de compression T_c, P_c).

Conclusion et perspectives

Les résultats expérimentaux obtenus nous ont permis de déterminer l'effet de la richesse et la température sur les délais d'auto-inflammation. Des changements ont été apportés dans le mécanisme cinétique notamment par la révision de certains paramètres cinétiques des réactions et l'ajout des réactions de basse température, afin d'améliorer la simulation et de pouvoir modéliser les délais les plus long à basse température. D'une manière globale, la version finale du mécanisme a prédit correctement les délais mesurés aux deux richesses

($\phi = 0,5$ et 1), les réactions rajoutées à posteriori n'avaient pas d'effet dans le cas du réacteur parfaitement agité. Des essais ont été réalisés en milieu riche à $\phi = 2$, les délais n'ont pas pu être mesurés sous ces conditions expérimentales dans le cadre de ce travail, du fait que le mélange s'est condensé dans le réservoir.

La plus grande partie de cette étude a été consacrée au développement du mécanisme cinétique de la fenchone. Un sous-mécanisme a été développé et intégré dans le mécanisme C₅[93]. Les paramètres cinétiques et thermodynamiques associés à la plupart des constantes de vitesse des réactions impliquées dans la consommation et la formation des espèces intermédiaires sont issus du code open source RMG dans sa version 3.0 et des analogies avec d'autres hydrocarbures similaires. L'ensemble des réactions d'arrachement d'hydrogène et les réactions de β -scission constituent les voies principales de consommation de la fenchone.

Enfin les données thermodynamiques ont été évaluées par la méthode d'additivité des groupes implémentée dans RMG.

Concernant les perspectives, l'étude de l'oxydation des terpènes bicycliques pourrait être envisageable d'une manière approfondie. Dans le cadre de notre étude nous avons décrit les réactions qui rentrent en jeu, servent à générer le mécanisme cinétique de combustion, de ce fait, ce travail pourrait être étendue à d'autres espèces polycycliques afin de mieux comprendre la réactivité complexe de ces composés mais aussi d'être capable de déterminer de nouvelles données thermodynamiques et cinétiques, ainsi que la génération de nouvelles règles et des corrélations associées pour les différents processus de mécanisme de combustion.

Les travaux effectués en machine à compression rapide pourraient être complétés en réalisant des essais dans d'autres conditions expérimentales ; en changeant le diluant, la richesse et la pression.

Pour compléter cette étude, il est souhaitable d'envisager des travaux dans d'autres types de réacteurs notamment les réacteurs à écoulement, les tubes à choc.

Références bibliographiques

Références bibliographiques

- [1] F. Ausfelder et K. Wagemann, « Power-to-Fuels: E-Fuels as an Important Option for a Climate-Friendly Mobility of the Future », *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 92, n° 1-2, p. 21-30, janv. 2020, doi: 10.1002/cite.201900180.
- [2] A. F. N. Abdul-Manan, V. Gordillo Zavaleta, A. K. Agarwal, G. Kalghatgi, et A. A. Amer, « Electrifying passenger road transport in India requires near-term electricity grid decarbonisation », *Nat Commun*, vol. 13, n° 1, Art. n° 1, avr. 2022, doi: 10.1038/s41467-022-29620-x.
- [3] A. Tremel, *Electricity-based Fuels*. in SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology. Cham: Springer International Publishing, 2018. doi: 10.1007/978-3-319-72459-1.
- [4] F. Hoppe *et al.*, « Tailor-made fuels for future engine concepts », *International Journal of Engine Research*, vol. 17, n° 1, p. 16-27, janv. 2016, doi: 10.1177/1468087415603005.
- [5] P. Hellier, L. Al-Haj, M. Talibi, S. Purton, et N. Ladommatos, « Combustion and emissions characterization of terpenes with a view to their biological production in cyanobacteria », *Fuel*, vol. 111, p. 670-688, sept. 2013, doi: 10.1016/j.fuel.2013.04.042.
- [6] D. McCollum et C. Yang, « Achieving deep reductions in US transport greenhouse gas emissions: Scenario analysis and policy implications », *Energy Policy*, vol. 37, n° 12, p. 5580-5596, déc. 2009, doi: 10.1016/j.enpol.2009.08.038.
- [7] J.-B. May-Carle, L. Pidol, A. Nicolle, J. M. Anderlohr, C. Togbé, et P. Dagaut, « Experimental and Numerical Study of F-T/Biodiesel/Bioethanol Surrogate Fuel Oxidation in Jet-Stirred Reactor », *Combustion Science and Technology*, vol. 184, n° 7-8, p. 901-915, juill. 2012, doi: 10.1080/00102202.2012.663982.
- [8] B. G. Harvey, M. E. Wright, et R. L. Quintana, « High-Density Renewable Fuels Based on the Selective Dimerization of Pinenes », *Energy Fuels*, vol. 24, n° 1, p. 267-273, janv. 2010, doi: 10.1021/ef900799c.
- [9] V. Sh. Fel'dblyum, T. N. Antonova, et N. S. Zefirov, « Cyclization and dehydrocyclization of C5 hydrocarbons over platinum nanocatalysts and in the presence of hydrogen sulfide », *Dokl Chem*, vol. 424, n° 2, p. 27-30, févr. 2009, doi: 10.1134/S0012500809020025.
- [10] E. V. Gusevskaya, « Reactions of Terpenes Catalyzed by Heteropoly Compounds: Valorization of Biorenewables », *ChemCatChem*, vol. 6, n° 6, p. 1506-1515, juin 2014, doi: 10.1002/cctc.201400052.
- [11] R. Mawhood, E. Gazis, S. De Jong, R. Hoefnagels, et R. Slade, « Production pathways for renewable jet fuel: a review of commercialization status and future prospects:

Références bibliographiques

- Renewable jet fuel technologies: commercialisation status and future prospects », *Biofuels, Bioprod. Bioref.*, vol. 10, n° 4, p. 462-484, juill. 2016, doi: 10.1002/bbb.1644.
- [12] A. Behr et L. Johnen, « Myrcene as a Natural Base Chemical in Sustainable Chemistry: A Critical Review », *ChemSusChem*, vol. 2, n° 12, p. 1072-1095, déc. 2009, doi: 10.1002/cssc.200900186.
- [13] A. Behr et L. Johnen, « Myrcene as a Natural Base Chemical in Sustainable Chemistry: A Critical Review », *ChemSusChem*, vol. 2, n° 12, p. 1072-1095, déc. 2009, doi: 10.1002/cssc.200900186.
- [14] H. A. Meylemans, R. L. Quintana, et B. G. Harvey, « Efficient conversion of pure and mixed terpene feedstocks to high density fuels », *Fuel*, vol. 97, p. 560-568, juill. 2012, doi: 10.1016/j.fuel.2012.01.062.
- [15] J. Xie *et al.*, « Synthesis of high-density liquid fuel via Diels-Alder reaction of dicyclopentadiene and lignocellulose-derived 2-methylfuran », *Catalysis Today*, vol. 319, p. 139-144, janv. 2019, doi: 10.1016/j.cattod.2018.04.053.
- [16] M. R. Raupach *et al.*, « Global and regional drivers of accelerating CO₂ emissions », *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 104, n° 24, p. 10288-10293, juin 2007, doi: 10.1073/pnas.0700609104.
- [17] E. J. Barrientos, M. Lapuerta, et A. L. Boehman, « Group additivity in soot formation for the example of C-5 oxygenated hydrocarbon fuels », *Combustion and Flame*, vol. 160, n° 8, p. 1484-1498, août 2013, doi: 10.1016/j.combustflame.2013.02.024.
- [18] F. P. Perera, « Multiple Threats to Child Health from Fossil Fuel Combustion: Impacts of Air Pollution and Climate Change », *Environmental Health Perspectives*, vol. 125, n° 2, p. 141-148, févr. 2017, doi: 10.1289/EHP299.
- [19] K. Mukhopadhyay, K. M. Krishna, et M. Sharon, « Fullerenes from camphor: A natural source », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, n° 20, p. 3182-3185, mai 1994, doi: 10.1103/PhysRevLett.72.3182.
- [20] G. Oza *et al.*, « Camphor-mediated synthesis of carbon nanoparticles, graphitic shell encapsulated carbon nanocubes and carbon dots for bioimaging », *Sci Rep*, vol. 6, n° 1, Art. n° 1, févr. 2016, doi: 10.1038/srep21286.
- [21] G. Kasiraman, B. Nagalingam, et M. Balakrishnan, « Performance, emission and combustion improvements in a direct injection diesel engine using cashew nut shell oil as fuel with camphor oil blending », *Energy*, vol. 47, n° 1, p. 116-124, nov. 2012, doi: 10.1016/j.energy.2012.09.022.

Références bibliographiques

- [22] A. M. Schweidtmann, J. G. Rittig, A. König, M. Grohe, A. Mitsos, et M. Dahmen, « Graph Neural Networks for Prediction of Fuel Ignition Quality », *Energy Fuels*, vol. 34, n° 9, p. 11395-11407, sept. 2020, doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c01533.
- [23] D. R. Stull, « Vapor Pressure of Pure Substances. Organic and Inorganic Compounds », *Ind. Eng. Chem.*, vol. 39, n° 4, p. 517-540, avr. 1947, doi: 10.1021/ie50448a022.
- [24] « <https://www.anses.fr/fr/system/files/AAAT2009sa0262.pdf> ». Consulté le: 5 mars 2023. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.anses.fr/fr/system/files/AAAT2009sa0262.pdf>
- [25] B. Coudour *et al.*, « Combustion Characteristics of Two Biogenic Volatile Organic Compounds: L-Fenchone and 3-Hexen-1-OL », *Combustion Science and Technology*, vol. 186, n° 10-11, p. 1284-1294, nov. 2014, doi: 10.1080/00102202.2014.934568.
- [26] F. Parsinejad, C. Arcari, et H. Metghalchi*, « FLAME STRUCTURE AND BURNING SPEED OF JP-10 AIR MIXTURES », *Combustion Science and Technology*, vol. 178, n° 5, p. 975-1000, avr. 2006, doi: 10.1080/00102200500270080.
- [27] L. Courty, K. Chetehouna, F. Halter, F. Foucher, J. P. Garo, et C. Mounaïm-Rousselle, « Experimental determination of emission and laminar burning speeds of α -pinene », *Combustion and Flame*, vol. 159, n° 4, p. 1385-1392, avr. 2012, doi: 10.1016/j.combustflame.2011.11.003.
- [28] A. M. Schweidtmann, J. G. Rittig, A. König, M. Grohe, A. Mitsos, et M. Dahmen, « Graph Neural Networks for Prediction of Fuel Ignition Quality », *Energy Fuels*, vol. 34, n° 9, p. 11395-11407, sept. 2020, doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c01533.
- [29] J. H. Badia, E. Ramírez, R. Bringué, F. Cunill, et J. Delgado, « New Octane Booster Molecules for Modern Gasoline Composition », *Energy Fuels*, vol. 35, n° 14, p. 10949-10997, juill. 2021, doi: 10.1021/acs.energyfuels.1c00912.
- [30] P. P. Morajkar *et al.*, « Effects of Camphor Oil Addition to Diesel on the Nanostructures and Oxidative Reactivity of Combustion-Generated Soot », *Energy Fuels*, vol. 33, n° 12, p. 12852-12864, déc. 2019, doi: 10.1021/acs.energyfuels.9b03390.
- [31] S. Ghosh et S. Banerjee, « Carbon-carbon bond cleavage in norbornane derivatives. Convenient route to novel carbocyclic rings », *Arkivoc*, vol. 2002, n° 7, p. 8-20, mai 2002, doi: 10.3998/ark.5550190.0003.702.
- [32] M. K. Abdrabou, P. P. Morajkar, G. D. J. Guerrero Peña, A. Raj, M. Elkadi, et A. V. Salkar, « Effect of 5-membered bicyclic hydrocarbon additives on nanostructural disorder and oxidative reactivity of diffusion flame-generated diesel soot », *Fuel*, vol. 275, p. 117918, sept. 2020, doi: 10.1016/j.fuel.2020.117918.

Références bibliographiques

- [33] M. Salamanca, M. L. Botero, J. W. Martin, J. A. H. Dreyer, J. Akroyd, et M. Kraft, « The impact of cyclic fuels on the formation and structure of soot », *Combustion and Flame*, vol. 219, p. 1-12, sept. 2020, doi: 10.1016/j.combustflame.2020.04.026.
- [34] R. J. Andrews, C. F. Smith, et A. J. Alexander, « Mechanism of carbon nanotube growth from camphor and camphor analogs by chemical vapor deposition », *Carbon*, vol. 44, n° 2, p. 341-347, févr. 2006, doi: 10.1016/j.carbon.2005.07.025.
- [35] B. Sirjean, O. Herbinet, P. A. Glaude, M. F. Ruiz-Lopez, et R. Fournet, « Theoretical Study of the Thermal Decomposition of a Jet Fuel Surrogate », *Kinetics*, mars 2007, doi: 10.48550/arXiv.0904.3538.
- [36] O. Herbinet, B. Sirjean, F. Battin-Leclerc, R. Fournet, et P.-M. Marquaire, « Thermal Decomposition of Norbornane (bicyclo[2.2.1]heptane) Dissolved in Benzene: Experimental Study and Mechanism Investigation », *Energy Fuels*, vol. 21, n° 3, p. 1406-1414, mai 2007, doi: 10.1021/ef0606411.
- [37] J. Xiao, J. Zhang, L. Pan, C. Shi, X. Zhang, et J.-J. Zou, « Photocatalytic Synthesis of High-Energy-Density Fuel: Catalysts, Mechanisms, and Challenges », *Trans. Tianjin Univ.*, vol. 27, n° 4, p. 280-294, août 2021, doi: 10.1007/s12209-021-00290-y.
- [38] M. V. Savos'kin *et al.*, « New approaches to the development of high-performance hydrocarbon propellants », *Russ J Appl Chem*, vol. 80, n° 1, p. 31-37, janv. 2007, doi: 10.1134/S1070427207010065.
- [39] H. Wang *et al.*, « Experimental and theoretical study on 2-ethylnorbornane pyrolysis under atmospheric and high pressure », *Fuel*, vol. 272, p. 117724, juill. 2020, doi: 10.1016/j.fuel.2020.117724.
- [40] N. Balcýoolu et V. Güner, « A High Temperature Kinetic Measurement with a Coupled Reactor-Gc System », *Instrumentation Science & Technology*, vol. 29, n° 3, p. 193-200, juin 2001, doi: 10.1081/CI-100103466.
- [41] W. Woods, « Mechanism of the Thermal Isomerization of Bicyclo[2,2,1]heptadiene », *J. Org. Chem.*, vol. 23, n° 1, p. 110-112, janv. 1958, doi: 10.1021/jo01095a617.
- [42] J. H. Birely et J. P. Chesick, « THE KINETICS OF THE THERMAL DECOMPOSITION OF [2,2,1]BICYCLOHEPTADIENE », *J. Phys. Chem.*, vol. 66, n° 3, p. 568-570, mars 1962, doi: 10.1021/j100809a515.
- [43] H. Wang, S. Gong, L. Wang, X. Zhang, et G. Liu, « High pressure pyrolysis mechanism and kinetics of a strained-caged hydrocarbon fuel quadricyclane », *Fuel*, vol. 239, p. 935-945, mars 2019, doi: 10.1016/j.fuel.2018.11.084.

Références bibliographiques

- [44] T. J. Bruno, M. L. Huber, A. Laesecke, E. W. Lemmon, et R. A. Perkins, « Thermochemical and thermophysical properties of JP-10 », National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, NIST IR 6640, 2006. doi: 10.6028/NIST.IR.6640.
- [45] M. B. Colket et L. J. Spadaccini, « Scramjet Fuels Autoignition Study », *Journal of Propulsion and Power*, vol. 17, n° 2, p. 315-323, mars 2001, doi: 10.2514/2.5744.
- [46] D. F. Davidson, D. C. Horning, J. T. Herbon, et R. K. Hanson, « Shock tube measurements of JP-10 ignition », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, n° 2, p. 1687-1692, janv. 2000, doi: 10.1016/S0082-0784(00)80568-8.
- [47] D. Davidson, D. Horning, M. Oehlschlaeger, et R. Hanson, « The decomposition products of JP-10 », in *37th Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Salt Lake City, UT, U.S.A.: American Institute of Aeronautics and Astronautics, juill. 2001. doi: 10.2514/6.2001-3707.
- [48] M. Capouet, J. Peeters, B. Nozière, et J.-F. Müller, « Alpha-pinene oxidation by OH: simulations of laboratory experiments », *Atmospheric Chemistry and Physics*, vol. 4, n° 9/10, p. 2285-2311, nov. 2004, doi: 10.5194/acp-4-2285-2004.
- [49] L. Vereecken et J. Peeters, « A theoretical study of the OH-initiated gas-phase oxidation mechanism of β -pinene (C₁₀H₁₆): first generation products », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 14, n° 11, p. 3802, 2012, doi: 10.1039/c2cp23711c.
- [50] W. C. Thomas, W. D. Dresser, D. A. Cortés, et M. J. Elrod, « Gas Phase Oxidation of Campholenic Aldehyde and Solution Phase Reactivity of its Epoxide Derivative », *J. Phys. Chem. A*, vol. 121, n° 1, p. 168-180, janv. 2017, doi: 10.1021/acs.jpca.6b08642.
- [51] S. D. Baruah, N. K. Gour, P. J. Sarma, et R. C. Deka, « OH-initiated mechanistic pathways and kinetics of camphene and fate of product radical: a DFT approach », *Environ Sci Pollut Res*, vol. 25, n° 3, p. 2147-2156, janv. 2018, doi: 10.1007/s11356-017-0646-2.
- [52] M. Subramani *et al.*, « Kinetics and degradation of camphene with OH radicals and its subsequent fate under the atmospheric O₂ and NO radicals - A theoretical study », *Chemosphere*, vol. 267, p. 129250, mars 2021, doi: 10.1016/j.chemosphere.2020.129250.
- [53] T. Sato et H. Obase, « Pyrolysis and photolysis of camphor oxime », *Tetrahedron Letters*, vol. 8, n° 17, p. 1633-1636, janv. 1967, doi: 10.1016/S0040-4039(00)70328-5.
- [54] M. Balachandran, « Synthesis and characterization of porous, mixed phase, wrinkled, few layer graphene like nanocarbon from charcoal », *Russian Journal of Physical Chemistry A*, vol. 89, p. 2438-2442, déc. 2015, doi: 10.1134/S0036024415130257.

Références bibliographiques

- [55] Z. Hong, D. F. Davidson, S. S. Vasu, et R. K. Hanson, « The effect of oxygenates on soot formation in rich heptane mixtures: A shock tube study », *Fuel*, vol. 88, n° 10, p. 1901-1906, oct. 2009, doi: 10.1016/j.fuel.2009.04.013.
- [56] K. B. Wiberg, « The Concept of Strain in Organic Chemistry », *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, vol. 25, n° 4, p. 312-322, avr. 1986, doi: 10.1002/anie.198603121.
- [57] B. J. Levandowski, T. A. Hamlin, F. M. Bickelhaupt, et K. N. Houk, « Role of Orbital Interactions and Activation Strain (Distortion Energies) on Reactivities in the Normal and Inverse Electron-Demand Cycloadditions of Strained and Unstrained Cycloalkenes », *J. Org. Chem.*, vol. 82, n° 16, p. 8668-8675, août 2017, doi: 10.1021/acs.joc.7b01673.
- [58] L. Birladeanu, « The Story of the Wagner-Meerwein Rearrangement », *J. Chem. Educ.*, vol. 77, n° 7, p. 858, juill. 2000, doi: 10.1021/ed077p858.
- [59] H. E. O'Neal et S. W. Benson, « A thermochemical and kinetic analysis of the mechanisms of pyrolysis of polycyclic molecules », *Int. J. Chem. Kinet.*, vol. 2, n° 6, p. 423-456, nov. 1970, doi: 10.1002/kin.550020602.
- [60] B. A. Horn, J. L. Herek, et A. H. Zewail, « Retro-Diels–Alder Femtosecond Reaction Dynamics », *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 118, n° 36, p. 8755-8756, janv. 1996, doi: 10.1021/ja9620696.
- [61] P. R. Khoury, J. D. Goddard, et W. Tam, « Ring strain energies: substituted rings, norbornanes, norbornenes and norbornadienes », *Tetrahedron*, vol. 60, n° 37, p. 8103-8112, sept. 2004, doi: 10.1016/j.tet.2004.06.100.
- [62] J. D. Yoneda, P. R. Seidl, K. Z. Leal, M. G. Campos, et R. Rittner, « A theoretical investigation of steric effects on ¹H chemical shifts of camphor and norcamphor derivatives », *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, vol. 767, n° 1-3, p. 29-36, août 2006, doi: 10.1016/j.theochem.2006.04.036.
- [63] K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, et M. M. Maslov, « Influence of methyl functional groups on the stability of cubane carbon cage », *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 81, p. 1-6, juill. 2016, doi: 10.1016/j.physe.2016.02.010.
- [64] C.-W. Zhou, J. M. Simmie, et H. J. Curran, « Ab initio and kinetic study of the reaction of ketones with $\dot{\text{O}}\text{H}$ for $T = 500\text{--}2000$ K. Part I: hydrogen-abstraction from $\text{H}_3\text{CC}(\text{O})\text{CH}_3\text{--x}(\text{CH}_3)_x$, $x = 0 \rightarrow 2$ », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 13, n° 23, p. 11175, 2011, doi: 10.1039/c0cp02754e.
- [65] S. Thion, C. Togbé, G. Dayma, Z. Serinyel, et P. Dagaut, « Experimental and Detailed Kinetic Modeling Study of Cyclopentanone Oxidation in a Jet-Stirred Reactor at 1 and 10

Références bibliographiques

- atm », *Energy Fuels*, vol. 31, n° 3, p. 2144-2155, mars 2017, doi: 10.1021/acs.energyfuels.6b02061.
- [66] J. J. Evangelista, R. Shinnar, et S. Katz, « The effect of imperfect mixing on stirred combustion reactors », *Symposium (International) on Combustion*, vol. 12, n° 1, p. 901-912, janv. 1969, doi: 10.1016/S0082-0784(69)80470-4.
- [67] P. Dagaut *et al.*, « A jet-stirred reactor for kinetic studies of homogeneous gas-phase reactions at pressures up to ten atmospheres », *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, vol. 19, n° 3, p. 207-209, mars 1986, doi: 10.1088/0022-3735/19/3/009.
- [68] D. Matras et J. Villermaux, « Un réacteur continu parfaitement agité par jets gazeux pour l'étude cinétique de réactions chimiques rapides », *Chemical Engineering Science*, vol. 28, n° 1, p. 129-137, janv. 1973, doi: 10.1016/0009-2509(73)85093-6.
- [69] K. Schofield, « The enigmatic mechanism of the flame ionization detector: Its overlooked implications for fossil fuel combustion modeling », *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 34, n° 3, p. 330-350, doi: 10.1016/j.pecs.2007.08.001.
- [70] M. D. Le, « L'étude de l'influence de la structure chimique des additifs sur le contrôle de la réactivité des carburants », Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2020.
- [71] M. Pochet, V. Dias, B. Moreau, F. Foucher, H. Jeanmart, et F. Contino, « Experimental and numerical study, under LTC conditions, of ammonia ignition delay with and without hydrogen addition », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, n° 1, p. 621-629, 2019, doi: 10.1016/j.proci.2018.05.138.
- [72] Y. Wu, M. Yang, C. Tang, Y. Liu, P. Zhang, et Z. Huang, « Promoting “adiabatic core” approximation in a rapid compression machine by an optimized creviced piston design », *Fuel*, vol. 251, p. 328-340, sept. 2019, doi: 10.1016/j.fuel.2019.04.030.
- [73] G. Mittal et C.-J. Sung, « Aerodynamics inside a rapid compression machine », *Combustion and Flame*, vol. 145, n° 1-2, p. 160-180, avr. 2006, doi: 10.1016/j.combustflame.2005.10.019.
- [74] S. Tanaka, F. Ayala, et J. C. Keck, « A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine », *Combustion and Flame*, vol. 133, n° 4, p. 467-481, juin 2003, doi: 10.1016/S0010-2180(03)00057-9.
- [75] V. H. Carvalho-Silva, N. D. Coutinho, et V. Aquilanti, « Temperature Dependence of Rate Processes Beyond Arrhenius and Eyring: Activation and Transitivity », *Front. Chem.*, vol. 7, p. 380, mai 2019, doi: 10.3389/fchem.2019.00380.
- [76] I. R. Sims, « Tunnelling in space », *Nature Chem*, vol. 5, n° 9, p. 734-736, sept. 2013, doi: 10.1038/nchem.1736.

Références bibliographiques

- [77] « N°219 - novembre-décembre 1998 - L'Actualité Chimique, le journal de la SCF », Société Chimique de France (SCF). [En ligne]. Disponible sur: <https://new.societechimiquedefrance.fr/numero/n219-novembre-decembre-1998/>
- [78] J. Troe, « Unimolecular Reactions. 2. Aufl., von K.A. Holbrook, M.J. Pilling und S.H. Robertson. Wiley, Chichester, 1996. 417 S., geb. 90.00 £ -ISBN 0-417-92268-4 », *Angew. Chem.*, vol. 109, n° 5, p. 549-550, mars 1997, doi: 10.1002/ange.19971090532.
- [79] S. Thion, « Etude expérimentale et numérique de la cinétique d'oxydation de biocarburants lignocellulosiques : cétones, éthers et lévulinate », Thèse de doctorat, Orléans, 2016. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.theses.fr/2016ORLE2036>
- [80] « ChemKin_Theory_PaSR.pdf ». Consulté le: 26 juin 2023. [En ligne]. Disponible sur: https://personal.ems.psu.edu/~radovic/ChemKin_Theory_PaSR.pdf
- [81] S. Gordon et B. J. McBride, « Thermodynamic Data to 20,000 K For Monatomic Gases ». 1 juin 1999.
- [82] R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke, J. A. Miller, et E. Meeks, « PREMIX: A FORTRAN Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames ».
- [83] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, et C. K. Westbrook, « A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation », *Combustion and Flame*, vol. 114, n° 1, p. 149-177, juill. 1998, doi: 10.1016/S0010-2180(97)00282-4.
- [84] « Griffiths, J. F. and J. A. Barnard (1995)., « Flame and Combustion », Routledge & CRC Press. »
- [85] M. S. Johnson et W. H. Green, « A Decision Tree Based Machine Learning Algorithm for Rate Estimation », Massachusetts Institute of Technology (77 Massachusetts Avenue, Cambridge, MA 02139, USA), DOE-MIT-0007982, nov. 2019. doi: 10.2172/1763640.
- [86] A. S. Tomlin, T. Turányi, et M. J. Pilling, « Chapter 4 Mathematical tools for the construction, investigation and reduction of combustion mechanisms », in *Comprehensive Chemical Kinetics*, vol. 35, Elsevier, 1997, p. 293-437. doi: 10.1016/S0069-8040(97)80019-2.
- [87] S. W. Benson et J. H. Buss, « Additivity Rules for the Estimation of Molecular Properties. Thermodynamic Properties », *The Journal of Chemical Physics*, vol. 29, n° 3, p. 546-572, sept. 1958, doi: 10.1063/1.1744539.
- [88] M. Liu *et al.*, « Reaction Mechanism Generator v3.0: Advances in Automatic Mechanism Generation », *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 61, n° 6, p. 2686-2696, juin 2021, doi: 10.1021/acs.jcim.0c01480.

Références bibliographiques

- [89] C. W. Gao, J. W. Allen, W. H. Green, et R. H. West, « Reaction Mechanism Generator: Automatic construction of chemical kinetic mechanisms », *Computer Physics Communications*, vol. 203, p. 212-225, juin 2016, doi: 10.1016/j.cpc.2016.02.013.
- [90] L. S. Tee, S. Gotoh, et W. E. Stewart, « Molecular Parameters for Normal Fluids. Lennard-Jones 12-6 Potential », *Ind. Eng. Chem. Fund.*, vol. 5, n° 3, p. 356-363, août 1966, doi: 10.1021/i160019a011.
- [91] « ANSYS CHEMKIN 20.0, ANSYS Reaction Design 2022, (2022). »
- [92] « rmg., <https://rmg.mit.edu/> ».
- [93] G. Dayma, S. Thion, Z. Serinyel, et P. Dagaut, « Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of cyclopentane and methylcyclopentane at atmospheric pressure », *Int. J. Chem. Kinet.*, vol. 52, n° 12, p. 943-956, déc. 2020, doi: 10.1002/kin.21412.
- [94] H. Wang, B. Zhang, S. Gong, L. Wang, X. Zhang, et G. Liu, « Experimental and modeling studies of quadricyclane and 2-ethylnorbornane pyrolysis from atmospheric to high pressure », *Combustion and Flame*, vol. 226, p. 163-181, avr. 2021, doi: 10.1016/j.combustflame.2020.11.042.
- [95] G. R. Magoon, H.-W. Wong, O. O. Oluwole, D. K. Lewis, N. M. Vandewiele, et K. M. Van Geem, « JP-10 combustion studied with shock tube experiments and modeled with automatic reaction mechanism generation », *Combustion and Flame*, vol. 162, n° 8, p. 3115-3129, août 2015, doi: 10.1016/j.combustflame.2015.02.010.
- [96] R. Sivaramakrishnan, J. V. Michael, et B. Ruscic, « High-temperature rate constants for $H/D + C_2H_6$ and C_3H_8 », *Int J of Chemical Kinetics*, vol. 44, n° 3, p. 194-205, mars 2012, doi: 10.1002/kin.20607.
- [97] B. Sirjean, O. Herbinet, P.-A. Glaude, M. F. Ruiz-Lopez, et R. Fournet, « Theoretical Study of the Thermal Decomposition of a Jet Fuel Surrogate ». arXiv, 22 avril 2009. doi: 10.48550/arXiv.0904.3538.
- [98] « Mechanism and Rate Constants for the Decomposition of 1-Pentenyl Radicals ». [En ligne]. Disponible sur: <https://pubs.acs.org/doi/epdf/10.1021/jp058125j>
- [99] S. M. Handford-Styring et R. W. Walker, « Rate constants for the reaction of HO₂ radicals with cyclopentane and propane between 673 and 783 K », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 4, n° 4, p. 620-627, févr. 2002, doi: 10.1039/b108578f.
- [100] V. S. Krasnoukhov, D. P. Porfiriev, I. P. Zavershinskiy, V. N. Azyazov, et A. M. Mebel, « Kinetics of the $CH_3 + C_5H_5$ Reaction: A Theoretical Study », *J. Phys. Chem. A*, vol. 121, n° 48, p. 9191-9200, déc. 2017, doi: 10.1021/acs.jpca.7b09873.

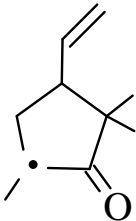
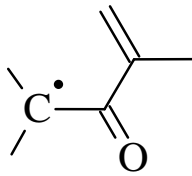
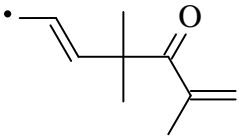
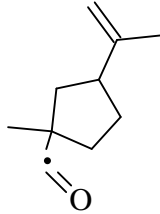
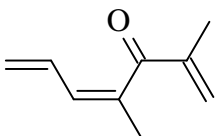
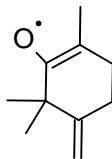
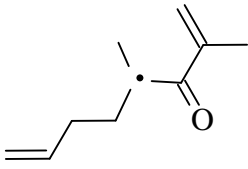
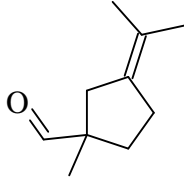
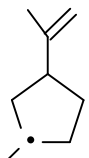
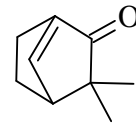
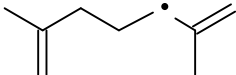
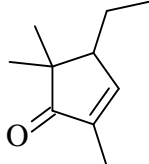
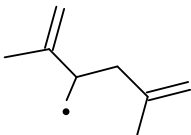
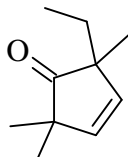
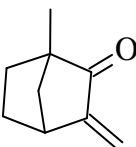
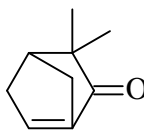
Références bibliographiques

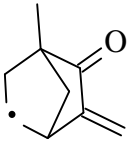
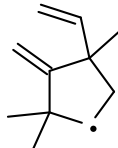
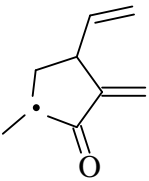
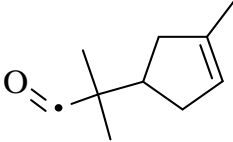
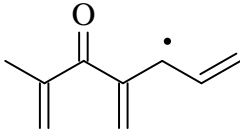
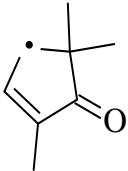
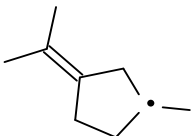
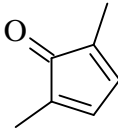
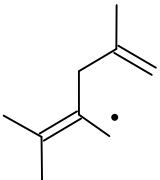
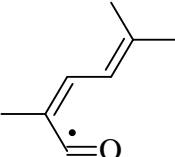
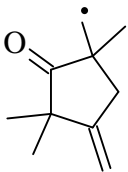
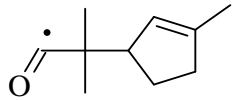
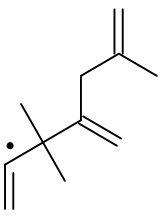
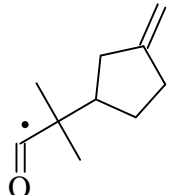
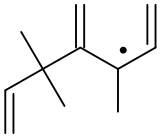
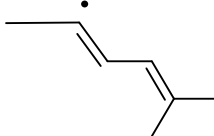
- [101] N. Hansen, B. Yang, W. Li, P. R. Westmoreland, P. Oßwald, et K. Kohse-Höinghaus, « Fuel-structure dependence of benzene formation processes in premixed flames fueled by C₆H₁₂ isomers », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, n° 1, p. 585-592, 2011, doi: 10.1016/j.proci.2010.05.056.

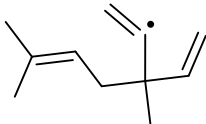
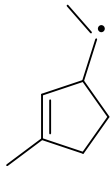
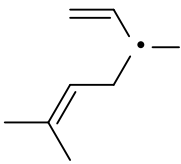
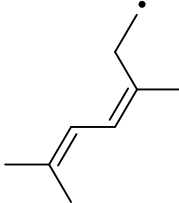
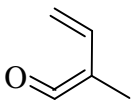
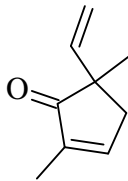
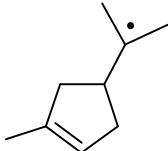
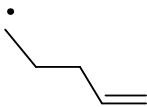
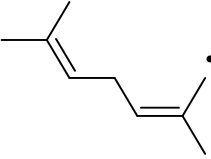
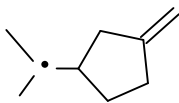
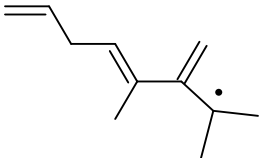
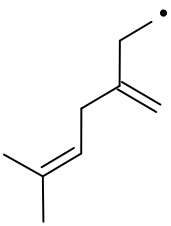
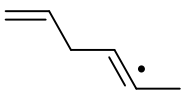
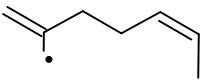
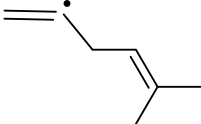
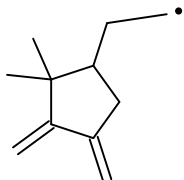
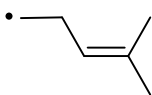
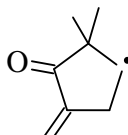
Annexe 4.1

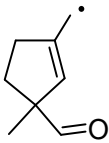
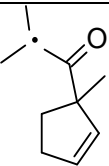
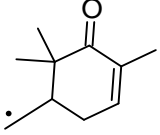
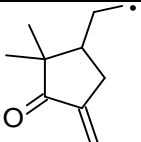
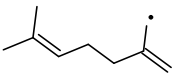

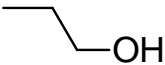
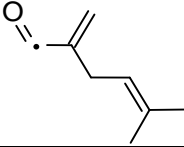
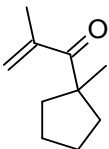
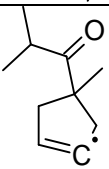
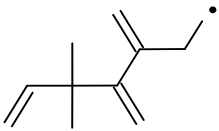
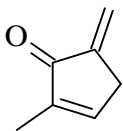
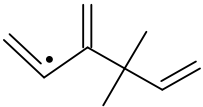
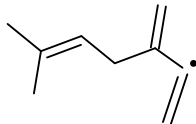
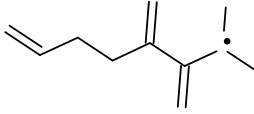
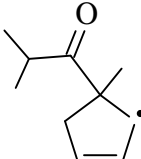
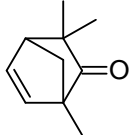
Nomenclature des espèces incluses dans le mécanisme cinétique développé au cours de cette thèse.

| Nom de l'espèce | Structure moléculaire | Nom de l'espèce | Structure moléculaire |
|-----------------|-----------------------|-----------------|-----------------------|
| fenchone | | ZS(19) | |
| F1(1) | | ZS(20) | |
| F2(11) | | ZS(21) | |
| F3(5) | | ZS(23) | |
| F4(3) | | S(661) | |
| F5(9) | | S(32) | |
| F6(7) | | S(566) | |
| ZS(1) | | dipco-24d | |

| | | | |
|--------|---|------------|---|
| ZS(2) |  | dipco-2d4j |  |
| ZS(3) |  | S(305) |  |
| ZS(5) |  | S(703) |  |
| ZS(6) |  | S(224) |  |
| ZS(7) |  | GD(1) |  |
| ZS(8) |  | GD(2) |  |
| ZS(9) |  | GD(3) |  |
| ZS(10) |  | GD(4) |  |

| | | | |
|--------|---|--------|---|
| ZS(11) |  | GD(5) |  |
| ZS(12) |  | GD(6) |  |
| ZS(13) |  | GD(7) |  |
| ZS(14) |  | GD(8) |  |
| ZS(15) |  | GD(9) |  |
| ZS(16) |  | S(279) |  |
| ZS(17) |  | S(33) |  |
| GD(14) |  | GD(10) |  |

| | | | |
|--------|---|------------|---|
| GD(15) |  | GD(11) |  |
| GD(16) |  | GD(12) |  |
| GD(17) |  | GD(13) |  |
| GD(18) |  | GD(27) |  |
| GD(19) |  | C9H15(38) |  |
| GD(20) |  | C9H15(392) |  |
| GD(21) |  | C9H15(41) |  |
| GD(22) |  | S(306) |  |
| GD(23) |  | S(260) |  |

| | | | |
|-----------|---|------------|---|
| S(579) |  | S(660) |  |
| S(376) |  | S(306) |  |
| C9H15(41) |  | S(2244) |  |
| S(2293) |  | S(582) |  |
| S(677) |  | S(825) |  |
| GD(24) |  | C7H8O(583) |  |
| GD(25) |  | S(582) |  |
| GD(26) |  | S(822) |  |
| Fnone |  | | |

Annexe 4.2

Mécanisme cinétique développé
au cours de cette thèse.

| ELEMENTS CONSIDERED | ATOMIC WEIGHT |
|------------------------|------------------|
| 1. h | 1.00797 |
| 2. c | 12.0112 |
| 3. o | 15.9994 |
| 4. n | 14.0067 |
| 5. ar | 39.9480 |
| 6. he | 4.00260 |

| SPECIES CONSIDERED | P H A R S G E E | C H A R S G E E | MOLECULAR WEIGHT | TEMPERATURE | | ELEMENT COUNT | | o | n | ar | he |
|-----------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|---------------------|-------------|------|---------------|---|---|---|----|----|
| | | | | LOW | HIGH | h | c | | | | |
| 1. co | G | 0 | 2.8011E+01 | 200 | 6000 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 2. o2 | G | 0 | 3.1999E+01 | 200 | 6000 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 3. co2 | G | 0 | 4.4010E+01 | 200 | 6000 | 0 | 1 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 4. h2o | G | 0 | 1.8015E+01 | 200 | 6000 | 2 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 5. ch4 | G | 0 | 1.6043E+01 | 200 | 6000 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6. h2 | G | 0 | 2.0159E+00 | 200 | 6000 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7. c2h2 | G | 0 | 2.6038E+01 | 200 | 6000 | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 8. ch2o | G | 0 | 3.0026E+01 | 200 | 6000 | 2 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 9. ch3cho | G | 0 | 4.4054E+01 | 200 | 6000 | 4 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 10. c2h5cho | G | 0 | 5.8081E+01 | 200 | 6000 | 6 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 11. nc3h7cho | G | 0 | 7.2108E+01 | 300 | 5000 | 8 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 12. c2h3cho | G | 0 | 5.6065E+01 | 200 | 6000 | 4 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 13. c2h4 | G | 0 | 2.8054E+01 | 200 | 6000 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 14. c3h6 | G | 0 | 4.2081E+01 | 298 | 3000 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15. c4h8-1 | G | 0 | 5.6108E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16. ch3oh | G | 0 | 3.2042E+01 | 200 | 6000 | 4 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 17. c4h6 | G | 0 | 5.4092E+01 | 300 | 3000 | 6 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 18. c2h6 | G | 0 | 3.0070E+01 | 300 | 5000 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 19. c3h8 | G | 0 | 4.4097E+01 | 300 | 5000 | 8 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 20. nc4h10 | G | 0 | 5.8124E+01 | 200 | 6000 | 10 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 21. c5h10-1 | G | 0 | 7.0135E+01 | 200 | 5000 | 10 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 22. c3h4-a | G | 0 | 4.0065E+01 | 200 | 6000 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 23. c3h4-p | G | 0 | 4.0065E+01 | 200 | 6000 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 24. c5h813 | G | 0 | 6.8120E+01 | 300 | 5000 | 8 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25. c5h814 | G | 0 | 6.8120E+01 | 300 | 4000 | 8 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |

| | | | | | | | | | | | |
|----------------|---|---|------------|-----|------|----|---|---|---|---|---|
| 26. c2h5oh | G | 0 | 4.6070E+01 | 300 | 5000 | 6 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 27. c2c5h10 | G | 0 | 7.0135E+01 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 28. t2c5h10 | G | 0 | 7.0135E+01 | 200 | 3000 | 10 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 29. h2o2 | G | 0 | 3.4015E+01 | 200 | 6000 | 2 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 30. ch3coch3 | G | 0 | 5.8081E+01 | 200 | 6000 | 6 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 31. ch2co | G | 0 | 4.2038E+01 | 200 | 6000 | 2 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 32. c2h4o1,2 | G | 0 | 4.4054E+01 | 300 | 5000 | 4 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 33. c4h4 | G | 0 | 5.2076E+01 | 300 | 5000 | 4 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 34. nc5h12 | G | 0 | 7.2151E+01 | 300 | 5000 | 12 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 35. ic4h8 | G | 0 | 5.6108E+01 | 300 | 5000 | 8 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 36. cpd | G | 0 | 6.6104E+01 | 300 | 5000 | 6 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 37. ic3h7cho | G | 0 | 7.2108E+01 | 300 | 3000 | 8 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 38. isope | G | 0 | 6.8120E+01 | 298 | 5000 | 8 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 39. ic3h5cho | G | 0 | 7.0092E+01 | 300 | 5000 | 6 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 40. but2m2d | G | 0 | 7.0135E+01 | 200 | 3000 | 10 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 41. but2m1d | G | 0 | 7.0135E+01 | 200 | 3000 | 10 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 42. c6h6 | G | 0 | 7.8115E+01 | 200 | 6000 | 6 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 43. t2c4h8 | G | 0 | 5.6108E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 44. c2c4h8 | G | 0 | 5.6108E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 45. ic4h10 | G | 0 | 5.8124E+01 | 300 | 5000 | 10 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 46. butyne | G | 0 | 5.4092E+01 | 300 | 5000 | 6 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 47. butyn2 | G | 0 | 5.4092E+01 | 200 | 6000 | 6 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 48. ch3ocho | G | 0 | 6.0053E+01 | 300 | 5000 | 4 | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 49. nc4h9cho | G | 0 | 8.6135E+01 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 50. c5h11cho | G | 0 | 1.0016E+02 | 300 | 5000 | 12 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 51. nc6h14 | G | 0 | 8.6178E+01 | 300 | 5000 | 14 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 52. c6h12-1 | G | 0 | 8.4163E+01 | 300 | 5000 | 12 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 53. c6h12-2 | G | 0 | 8.4163E+01 | 300 | 5000 | 12 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 54. c6h12-3 | G | 0 | 8.4163E+01 | 300 | 5000 | 12 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 55. hexcy5o2 | G | 0 | 1.0016E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 56. hexcy4o1 | G | 0 | 1.0016E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 57. hexcy4o2 | G | 0 | 1.0016E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 58. hexcy3o1 | G | 0 | 1.0016E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 59. c4h612 | G | 0 | 5.4092E+01 | 300 | 3000 | 6 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 60. c4h2 | G | 0 | 5.0061E+01 | 200 | 6000 | 2 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 61. pc4h9oh | G | 0 | 7.4124E+01 | 300 | 3000 | 10 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 62. cyc5h10 | G | 0 | 7.0135E+01 | 200 | 6000 | 10 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 63. mcp | G | 0 | 8.4163E+01 | 300 | 3000 | 12 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 64. cyc6h12 | G | 0 | 8.4163E+01 | 300 | 3000 | 12 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 65. cyc6h10 | G | 0 | 8.2147E+01 | 300 | 3000 | 10 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 66. cypentoh | G | 0 | 8.6135E+01 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 67. cyc5h8oh-1 | G | 0 | 8.5127E+01 | 300 | 5000 | 9 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 68. cyc5h8oh-2 | G | 0 | 8.5127E+01 | 300 | 5000 | 9 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 69. cyc5h8oh-3 | G | 0 | 8.5127E+01 | 300 | 5000 | 9 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 70. cyc5h8o | G | 0 | 8.4119E+01 | 300 | 1900 | 8 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----------------|---|---|------------|-----|------|----|----|---|---|---|---|-----------------|---|---|------------|-----|------|----|----|---|---|---|---|
| 71. acyc5h6o | G | 0 | 8.2103E+01 | 300 | 1900 | 6 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 116. GD(30) | G | 0 | 1.0713E+02 | 100 | 5000 | 7 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 72. bcyc5h6o | G | 0 | 8.2103E+01 | 300 | 1900 | 6 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 117. GD(31) | G | 0 | 1.0713E+02 | 100 | 5000 | 7 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 73. but2m2oh | G | 0 | 8.8151E+01 | 200 | 3000 | 12 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 118. GD(32) | G | 0 | 7.9123E+01 | 100 | 5000 | 7 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 74. pent1oh | G | 0 | 8.8151E+01 | 300 | 5000 | 12 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 119. GD(22bis) | G | 0 | 9.5166E+01 | 100 | 5000 | 11 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 75. pent2oh | G | 0 | 8.8151E+01 | 200 | 3000 | 12 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 120. S(279) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 76. pro2oh | G | 0 | 6.0097E+01 | 300 | 3000 | 8 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 | 121. S(660) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 77. pent3oh | G | 0 | 8.8151E+01 | 300 | 5000 | 12 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 122. S(376) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 78. c2h5coc2h5 | G | 0 | 8.6135E+01 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 123. S(306) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 79. pro1oh | G | 0 | 6.0097E+01 | 300 | 3000 | 8 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 | 124. S(33) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 80. fenchone | G | 0 | 1.5224E+02 | 100 | 5000 | 16 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 125. S(721) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 81. F1(1) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 126. S(260) | G | 0 | 1.2318E+02 | 100 | 5000 | 11 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 82. F2(11) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 127. C9H15(38) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 83. F3(5) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 128. C6H9(245) | G | 0 | 8.1139E+01 | 100 | 5000 | 9 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 84. F4(3) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 129. C7H7Om | G | 0 | 1.0713E+02 | 100 | 5000 | 7 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 85. F5(9) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 130. C7H7Os | G | 0 | 1.0713E+02 | 100 | 5000 | 7 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 86. F6(7) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 131. S(2244) | G | 0 | 5.5057E+01 | 100 | 5000 | 3 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 87. GD(1) | G | 0 | 1.3620E+02 | 100 | 5000 | 12 | 9 | 1 | 0 | 0 | 0 | 132. C9H15(392) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 88. GD(2) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 133. C3HO(1977) | G | 0 | 5.3041E+01 | 100 | 5000 | 1 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 89. GD(3) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 134. C9H15(41) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 90. GD(4) | G | 0 | 1.3620E+02 | 100 | 5000 | 12 | 9 | 1 | 0 | 0 | 0 | 135. C7H8O(583) | G | 0 | 1.0814E+02 | 100 | 5000 | 8 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 91. GD(5) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 136. S(582) | G | 0 | 1.2318E+02 | 100 | 5000 | 11 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 92. GD(6) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 137. S(2293) | G | 0 | 5.4049E+01 | 100 | 5000 | 2 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 93. GD(7) | G | 0 | 1.2318E+02 | 100 | 5000 | 11 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 | 138. S(312) | G | 0 | 1.5224E+02 | 100 | 5000 | 16 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 94. GD(8) | G | 0 | 1.0814E+02 | 100 | 5000 | 8 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | 139. S(677) | G | 0 | 1.5224E+02 | 100 | 5000 | 16 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 95. GD(9) | G | 0 | 1.2318E+02 | 100 | 5000 | 11 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 | 140. ZS(1) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 96. GD(10) | G | 0 | 9.5166E+01 | 100 | 5000 | 11 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 141. ZS(2) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 97. GD(11) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 142. ZS(3) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 98. GD(12) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 143. S(661) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 99. GD(13) | G | 0 | 1.3620E+02 | 100 | 5000 | 12 | 9 | 1 | 0 | 0 | 0 | 144. ZS(5) | G | 0 | 1.3620E+02 | 100 | 5000 | 12 | 9 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 100. GD(14) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 145. ZS(4) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 101. GD(15) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 146. mcptds2d | G | 0 | 8.0131E+01 | 100 | 5000 | 8 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 102. GD(16) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 147. S(32) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 103. GD(17) | G | 0 | 8.2103E+01 | 100 | 5000 | 6 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 148. S(566) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 104. GD(18) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 149. ZS(22) | G | 0 | 1.3620E+02 | 100 | 5000 | 12 | 9 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 105. GD(19) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 150. dipco-24d | G | 0 | 1.1016E+02 | 100 | 5000 | 10 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 106. GD(20) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | 151. dipco-2d4j | G | 0 | 1.1117E+02 | 100 | 5000 | 11 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 107. GD(21) | G | 0 | 8.1139E+01 | 100 | 5000 | 9 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 152. ZS(6) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 108. GD(22) | G | 0 | 9.5166E+01 | 100 | 5000 | 11 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 153. S(305) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 109. GD(23) | G | 0 | 8.3155E+01 | 100 | 5000 | 11 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 154. ZS(7) | G | 0 | 1.2322E+02 | 100 | 5000 | 15 | 9 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 110. GD(24) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | | |
| 111. GD(25) | G | 0 | 1.2318E+02 | 100 | 5000 | 11 | 8 | 1 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | | |
| 112. GD(26) | G | 0 | 1.5123E+02 | 100 | 5000 | 15 | 10 | 1 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | | |
| 113. GD(27) | G | 0 | 8.1139E+01 | 100 | 5000 | 9 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | | |
| 114. GD(28) | G | 0 | 1.0713E+02 | 100 | 5000 | 7 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | | |
| 115. GD(29) | G | 0 | 7.9123E+01 | 100 | 5000 | 7 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | | | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|------|------------|---|---|------------|-----|------|----|---|---|---|---|---|---|------|------------|---|---|------------|-----|------|----|---|---|---|---|---|
| 387. | hex2o2h1*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 445. | cyc5h9o | G | 0 | 8.5127E+01 | 300 | 5000 | 9 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 388. | hex3o2h1*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 5000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 446. | cyptn1oh | G | 0 | 8.4119E+01 | 300 | 5000 | 8 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 389. | c6h1124 | G | 0 | 8.3155E+01 | 300 | 5000 | 11 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 447. | cyptn2oh | G | 0 | 8.4119E+01 | 300 | 5000 | 8 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 390. | hex4o2h1*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 448. | cyptn3oh | G | 0 | 8.4119E+01 | 300 | 5000 | 8 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 391. | hex5o2h1*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 449. | ch2choo | G | 0 | 5.9045E+01 | 298 | 3000 | 3 | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 392. | hex1o2h2*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 450. | ic4h9 | G | 0 | 5.7116E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 393. | hex3o2h2*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 451. | ic4h7 | G | 0 | 5.5100E+01 | 300 | 5000 | 7 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 394. | hex4o2h2*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 5000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 452. | tc4h9 | G | 0 | 5.7116E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 395. | hex5o2h2*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 453. | ic3h7co | G | 0 | 7.1100E+01 | 300 | 3000 | 7 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 396. | hex2o2h3*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 454. | ic4h8io2h | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 4000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 397. | hex4o2h3*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 455. | ho2ic4h7io | G | 0 | 1.0411E+02 | 300 | 4000 | 8 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 398. | hex1o2h4*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 456. | ic4h9o2 | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 399. | hex2o2h4*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 457. | tc3h6cho | G | 0 | 7.1100E+01 | 300 | 3000 | 7 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 400. | hex1o2h | G | 0 | 1.1818E+02 | 300 | 4000 | 14 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 458. | ic3h5co | G | 0 | 6.9084E+01 | 300 | 5000 | 5 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 401. | hex2o2h | G | 0 | 1.1818E+02 | 300 | 4000 | 14 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 459. | isopy | G | 0 | 6.7112E+01 | 298 | 5000 | 7 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 402. | hex3o2h | G | 0 | 1.1818E+02 | 300 | 4000 | 14 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 460. | but3mldt | G | 0 | 6.9127E+01 | 300 | 4000 | 9 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 403. | c6h1131 | G | 0 | 8.3155E+01 | 300 | 5000 | 11 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 461. | tc4h8io2h | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 4000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 404. | c6h1013 | G | 0 | 8.2147E+01 | 300 | 5000 | 10 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 462. | ho2tc4h7io | G | 0 | 1.0411E+02 | 300 | 4000 | 8 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 405. | hex1o2h5j | G | 0 | 1.1717E+02 | 300 | 4000 | 13 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 463. | ch2cch2oh | G | 0 | 5.7073E+01 | 300 | 5000 | 5 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 406. | hex1o2h5o2 | G | 0 | 1.4917E+02 | 300 | 4000 | 13 | 6 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 464. | ic4h8o | G | 0 | 7.2108E+01 | 300 | 5000 | 8 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 407. | hex3o2h1j | G | 0 | 1.1717E+02 | 300 | 4000 | 13 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 465. | ic4h8oh | G | 0 | 7.3116E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 408. | hex3o2h1o2 | G | 0 | 1.4917E+02 | 300 | 4000 | 13 | 6 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 466. | ic4h7o | G | 0 | 7.1100E+01 | 300 | 5000 | 7 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 409. | hex1o2h3*o | G | 0 | 1.3216E+02 | 300 | 4000 | 12 | 6 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 467. | ic4h7ooh | G | 0 | 8.8107E+01 | 300 | 5000 | 8 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 410. | c6h12co | G | 0 | 1.1217E+02 | 300 | 5000 | 12 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 468. | ic4h7oh | G | 0 | 7.2108E+01 | 300 | 5000 | 8 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 411. | c6h10co | G | 0 | 1.1016E+02 | 300 | 5000 | 10 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 469. | ic4h9o2h | G | 0 | 9.0123E+01 | 300 | 5000 | 10 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 412. | but2m2oh-1 | G | 0 | 8.7143E+01 | 200 | 3000 | 11 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 470. | ic4h9o | G | 0 | 7.3116E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 413. | but2m2oh-3 | G | 0 | 8.7143E+01 | 200 | 3000 | 11 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 471. | ic4h8to2h | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 4000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 414. | but2m2oh-4 | G | 0 | 8.7143E+01 | 200 | 3000 | 11 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 472. | but3mldp | G | 0 | 6.9127E+01 | 300 | 4000 | 9 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 415. | mecoprco | G | 0 | 1.1314E+02 | 300 | 5000 | 9 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 473. | c6h5 | G | 0 | 7.7107E+01 | 200 | 6000 | 5 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 416. | etcoetco | G | 0 | 1.1314E+02 | 300 | 5000 | 9 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 474. | Mc6h6 | G | 0 | 7.8115E+01 | 300 | 5000 | 6 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 417. | procomeco | G | 0 | 1.1314E+02 | 300 | 5000 | 9 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 475. | c6h7c | G | 0 | 7.9123E+01 | 300 | 5000 | 6 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 418. | c4h9cocho | G | 0 | 1.1415E+02 | 300 | 5000 | 10 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 476. | HEX1245 | G | 0 | 7.8115E+01 | 200 | 6000 | 6 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 419. | c4h9coco | G | 0 | 1.1314E+02 | 300 | 5000 | 9 | 6 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 477. | FULVENE | G | 0 | 7.8115E+01 | 200 | 6000 | 6 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 420. | prcoch3-1o | G | 0 | 1.0113E+02 | 300 | 5000 | 9 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 478. | c6h5o | G | 0 | 9.3106E+01 | 200 | 6000 | 5 | 6 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 421. | hoco | G | 0 | 4.5018E+01 | 298 | 3000 | 1 | 1 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 479. | c5h5 | G | 0 | 6.5096E+01 | 300 | 3000 | 5 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 422. | c4h722 | G | 0 | 5.5100E+01 | 300 | 5000 | 7 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 480. | c6h615 | G | 0 | 7.8115E+01 | 200 | 6000 | 6 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 423. | but3mld | G | 0 | 7.0135E+01 | 300 | 4000 | 10 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 481. | phhco | G | 0 | 1.0613E+02 | 300 | 5000 | 6 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 424. | c4h71ooh1d | G | 0 | 8.8107E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 482. | cyc5h9 | G | 0 | 6.9127E+01 | 200 | 6000 | 9 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 425. | c4h71ooh2d | G | 0 | 8.8107E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 483. | cyc5h7 | G | 0 | 6.7112E+01 | 200 | 6000 | 7 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 426. | c4h71ooh3d | G | 0 | 8.8107E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 484. | lc5h5 | G | 0 | 6.5096E+01 | 300 | 5000 | 5 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 427. | c4h72ooh1d | G | 0 | 8.8107E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 485. | cc6h813 | G | 0 | 8.0131E+01 | 300 | 3000 | 8 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 428. | c4h72ooh2d | G | 0 | 8.8107E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 486. | c2o | G | 0 | 4.0022E+01 | 300 | 5000 | 0 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 429. | c4h72ooh3d | G | 0 | 8.8107E+01 | 200 | 6000 | 8 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 487. | but2mld3 | G | 0 | 6.9127E+01 | 300 | 5000 | 9 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 430. | ch2cooh | G | 0 | 5.9045E+01 | 300 | 1900 | 3 | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 488. | tc5h11 | G | 0 | 7.1143E+01 | 300 | 5000 | 11 | 5 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 431. | c5h5o13 | G | 0 | 8.1095E+01 | 200 | 6000 | 5 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 489. | c4h91o2 | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 432. | ch3cchoh | G | 0 | 5.7073E+01 | 300 | 5000 | 5 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 490. | c4h81ooh2j | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 433. | phch2 | G | 0 | 9.1134E+01 | 200 | 6000 | 7 | 7 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 491. | c4h81ooh1j | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 434. | phch2oh | G | 0 | 1.0814E+02 | 300 | 5000 | 8 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 492. | but1ooh2o2 | G | 0 | 1.2111E+02 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 435. | phch2o | G | 0 | 1.0713E+02 | 300 | 3000 | 7 | 7 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 493. | but1ooh3o2 | G | 0 | 1.2111E+02 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 436. | acyc5h7o | G | 0 | 8.3111E+01 | 300 | 1900 | 7 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 494. | but1ooh4o2 | G | 0 | 1.2111E+02 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 437. | bcy5h7o | G | 0 | 8.3111E+01 | 300 | 1900 | 7 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 495. | c4h91o2h | G | 0 | 9.0123E+01 | 300 | 5000 | 10 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 438. | a-acyc5h5o | G | 0 | 8.1095E+01 | 300 | 2000 | 5 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 496. | pc4h9o | G | 0 | 7.3116E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 439. | b-acyc5h5o | G | 0 | 8.1095E+01 | 300 | 2000 | 5 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 497. | c4h92o2 | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 440. | c5h5ooh | G | 0 | 9.8102E+01 | 100 | 5000 | 6 | 5 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 498. | c4h82ooh1j | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 441. | c5h5oh | G | 0 | 8.2103E+01 | 300 | 5000 | 6 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 499. | c4h82ooh2j | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 442. | lc5h5o | G | 0 | 8.1095E+01 | 300 | 5000 | 5 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 500. | c4h82ooh3j | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 443. | chchcho | G | 0 | 5.5057E+01 | 300 | 5000 | 3 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 501. | c4h82ooh4j | G | 0 | 8.9115E+01 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 |
| 444. | c5h3o | G | 0 | 7.9079E+01 | 300 | 3500 | 3 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 502. | but2ooh1o2 | G | 0 | 1.2111E+02 | 300 | 5000 | 9 | 4 | 4 | 0 | 0 | 0 |

| | | | | | | | | | | | | |
|------|---------------|---|---|------------|-----|------|----|---|---|---|---|---|
| 851. | pent3o2h1o2 | G | 0 | 1.3514E+02 | 300 | 5000 | 11 | 5 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 852. | pent3o2h2o2 | G | 0 | 1.3514E+02 | 300 | 5000 | 11 | 5 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 853. | pent2o2h1*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 854. | pent3o2h1*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 855. | pent4o2h1*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 856. | pent1o2h2*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 857. | pent3o2h2*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 858. | pent4o2h2*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 859. | pent5o2h2*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 860. | pent1o2h3*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 861. | pent2o2h3*o | G | 0 | 1.1813E+02 | 300 | 5000 | 10 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 862. | prcoch3-1o2 | G | 0 | 1.1713E+02 | 300 | 5000 | 9 | 5 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 863. | pc4h8oh-2oo | G | 0 | 1.0511E+02 | 300 | 3000 | 9 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 864. | sc4h8oh-1oo | G | 0 | 1.0511E+02 | 300 | 3000 | 9 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 865. | sc4h8oh-3oo | G | 0 | 1.0511E+02 | 300 | 3000 | 9 | 4 | 3 | 0 | 0 | 0 |
| 866. | ch2ch2ch2chco | G | 0 | 8.3111E+01 | 300 | 1900 | 7 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 867. | ch2coch2c2h3 | G | 0 | 8.3111E+01 | 300 | 1900 | 7 | 5 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 868. | c6h10-13d4m | G | 0 | 8.2147E+01 | 100 | 5000 | 10 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 869. | mcp2dt | G | 0 | 8.1139E+01 | 100 | 5000 | 9 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 870. | ch2-cyc5-3d | G | 0 | 8.0131E+01 | 100 | 5000 | 8 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 871. | c6h10-14d4m | G | 0 | 8.2147E+01 | 100 | 5000 | 10 | 6 | 0 | 0 | 0 | 0 |

REACTIONS CONSIDERED

| | A | b | E |
|--|-----------|------|---------|
| 1. F3 (5) +o2=>R3O2 | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 2. F4 (3) +o2=>R4O2 | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3. F5 (9) +o2=>R5O2 | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4. F6 (7) +o2=>R6O2 | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 5. R3O2=>F3 (5) +o2 | 1.70E+16 | 0.0 | 28000.0 |
| 6. R4O2=>F4 (3) +o2 | 1.70E+16 | 0.0 | 28000.0 |
| 7. R5O2=>F5 (9) +o2 | 1.70E+16 | 0.0 | 28000.0 |
| 8. R6O2=>F6 (7) +o2 | 1.70E+16 | 0.0 | 28000.0 |
| 9. F3 (5) +o2=>OLEF+ho2 | 1.00E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 10. F4 (3) +o2=>OLEF+ho2 | 1.00E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 11. R3O2=>OLEF+ho2 | 2.55E+16 | -1.2 | 32500.0 |
| 12. R4O2=>OLEF+ho2 | 2.55E+16 | -1.2 | 32500.0 |
| 13. R3O2=>QOOH | 2.00E+11 | 0.0 | 17000.0 |
| 14. R4O2=>QOOH | 2.00E+11 | 0.0 | 17000.0 |
| 15. R5O2=>QOOH | 2.00E+11 | 0.0 | 17000.0 |
| 16. R6O2=>QOOH | 2.00E+11 | 0.0 | 17000.0 |
| 17. QOOH=>cyOX+oh | 5.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 18. QOOH+o2=>O2QOOH | 5.60E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 19. O2QOOH=>HOOUOOH | 1.00E+11 | 0.0 | 17000.0 |
| 20. HOOUOOH=>OUOOH+oh | 1.00E+09 | 0.0 | 7500.0 |
| 21. OUOOH=>OUO+oh | 8.40E+13 | 0.0 | 41521.0 |
| 22. OUO=>3co+1c4h7v+c3h5-t+h | 1.00E+13 | 0.0 | 15000.0 |
| 23. h+F1 (1)=fenchone | 1.13E+14 | -0.6 | 178.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-03 (atm) | 3.995E+43 | -9.9 | 10192.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-02 (atm) | 3.434E+32 | -6.4 | 6659.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-01 (atm) | 7.398E+22 | -3.4 | 3341.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+00 (atm) | 3.319E+16 | -1.4 | 1076.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+01 (atm) | 1.130E+14 | -0.6 | 178.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+02 (atm) | 4.162E+13 | -0.5 | 20.0 |
| 24. h+F2 (11)=fenchone | 1.03E+14 | -0.6 | 165.0 |

| | | | |
|--|-----------|------|---------|
| Rate coefficients at P= 1.00E-03 (atm) | 5.222E+42 | -9.6 | 10027.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-02 (atm) | 4.134E+31 | -6.1 | 6390.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-01 (atm) | 1.896E+22 | -3.2 | 3146.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+00 (atm) | 1.994E+16 | -1.3 | 999.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+01 (atm) | 1.033E+14 | -0.6 | 165.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+02 (atm) | 4.120E+13 | -0.5 | 18.0 |
| 25. h+F3 (5)=fenchone | 1.09E+14 | -0.6 | 173.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-03 (atm) | 1.991E+43 | -9.8 | 10143.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-02 (atm) | 1.595E+32 | -6.3 | 6563.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-01 (atm) | 4.477E+22 | -3.3 | 3269.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+00 (atm) | 2.747E+16 | -1.4 | 1048.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+01 (atm) | 1.093E+14 | -0.6 | 173.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+02 (atm) | 4.146E+13 | -0.5 | 19.0 |
| 26. h+F4 (3)=fenchone | 1.13E+14 | -0.6 | 178.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-03 (atm) | 3.995E+43 | -9.9 | 10192.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-02 (atm) | 3.434E+32 | -6.4 | 6659.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-01 (atm) | 7.398E+22 | -3.4 | 3341.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+00 (atm) | 3.319E+16 | -1.4 | 1076.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+01 (atm) | 1.130E+14 | -0.6 | 178.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+02 (atm) | 4.162E+13 | -0.5 | 20.0 |
| 27. h+F5 (9)=fenchone | 3.12E+14 | -0.0 | 194.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-03 (atm) | 6.200E+44 | -9.6 | 10293.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-02 (atm) | 7.684E+33 | -6.1 | 6924.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-01 (atm) | 8.154E+23 | -3.0 | 3549.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+00 (atm) | 1.461E+17 | -0.9 | 1160.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+01 (atm) | 3.116E+14 | -0.0 | 194.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+02 (atm) | 1.049E+14 | 0.1 | 21.0 |
| 28. h+F6 (7)=fenchone | 3.11E+14 | -0.0 | 193.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-03 (atm) | 6.181E+44 | -9.6 | 10293.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-02 (atm) | 7.655E+33 | -6.1 | 6923.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E-01 (atm) | 8.118E+23 | -3.0 | 3548.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+00 (atm) | 1.456E+17 | -0.9 | 1160.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+01 (atm) | 3.113E+14 | -0.0 | 193.0 |
| Rate coefficients at P= 1.00E+02 (atm) | 1.049E+14 | 0.1 | 21.0 |
| 29. ho2+F1 (1)=o2+fenchone | 2.76E-02 | 3.8 | 6324.0 |
| 30. ho2+F2 (11)=o2+fenchone | 9.32E-02 | 3.7 | 6906.0 |
| 31. ho2+F3 (5)=o2+fenchone | 2.76E-02 | 3.8 | 6324.0 |
| 32. ho2+F4 (3)=o2+fenchone | 2.76E-02 | 3.8 | 6324.0 |
| 33. ho2+F5 (9)=o2+fenchone | 3.06E+00 | 3.3 | 9354.0 |
| 34. ho2+F6 (7)=o2+fenchone | 3.06E+00 | 3.3 | 9354.0 |
| 35. h+fenchone=h2+F3 (5) | 1.92E+09 | 1.5 | 5750.0 |
| 36. h+fenchone=h2+F4 (3) | 1.92E+09 | 1.5 | 5750.0 |
| 37. h+fenchone=h2+F5 (9) | 6.66E+05 | 2.5 | 6756.0 |
| 38. h+fenchone=h2+F6 (7) | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 |
| 39. o+fenchone=oh+F3 (5) | 1.11E+03 | 3.2 | 14117.0 |
| 40. o+fenchone=oh+F4 (3) | 1.11E+03 | 3.2 | 14117.0 |
| 41. o+fenchone=oh+F6 (7) | 1.87E+04 | 3.0 | 5230.0 |
| 42. o+fenchone=oh+F5 (9) | 9.34E+03 | 3.0 | 5230.0 |
| 43. oh+fenchone=h2o+F5 (9) | 1.35E+00 | 3.8 | -2897.0 |
| 44. oh+fenchone=h2o+F6 (7) | 2.70E+00 | 3.8 | -2897.0 |
| 45. oh+fenchone=h2o+F3 (5) | 4.64E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 46. oh+fenchone=h2o+F4 (3) | 4.64E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 47. ho2+fenchone=h2o2+F3 (5) | 3.36E+13 | 0.0 | 17686.0 |
| 48. ho2+fenchone=h2o2+F4 (3) | 3.36E+13 | 0.0 | 17686.0 |
| 49. ho2+fenchone=h2o2+F5 (9) | 1.14E+02 | 3.2 | 16250.0 |
| 50. ho2+fenchone=h2o2+F6 (7) | 2.28E+02 | 3.2 | 16250.0 |
| 51. ch3+fenchone=ch4+F5 (9) | 6.00E+12 | 0.0 | 12620.0 |
| 52. ch3+fenchone=ch4+F6 (7) | 1.20E+13 | 0.0 | 12620.0 |

| | | | | | | | | | |
|------|--|-----------|-------|---------|------|--|-----------|------|---------|
| 109. | F3(5)=ZS(1) | 1.13E+12 | 0.7 | 28987.2 | 163. | GD(25)=S(2293)+but3mldt | 1.76E+16 | 0.3 | 40143.1 |
| 110. | F3(5)=S(661) | 6.98E+08 | 1.3 | 20704.0 | 164. | S(721)=GD(26) | 1.72E+20 | -2.3 | 11088.4 |
| 111. | F3(5)=ZS(2) | 6.02E+08 | 1.4 | 23134.0 | 165. | GD(26)=ic3h6co+GD(27) | 2.27E+15 | 0.2 | 54272.0 |
| 112. | ZS(1)=ZS(3) | 1.31E+17 | -0.6 | 33236.0 | 166. | GD(27)=c3h4-a+c3h5-a | 8.10E+08 | 1.3 | 19163.3 |
| 113. | S(661)=mcps2dt+ic3h6co | 5.21E+20 | -1.4 | 44728.0 | 167. | h+ic3h5co=ic3h6co | 1.63E+13 | 0.3 | 0.0 |
| 114. | ZS(2)=ZS(3) | 2.34E+14 | -0.4 | 27350.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 115. | ZS(3)=ZS(5)+ch3 | 2.39E+12 | 0.6 | 38280.0 | 168. | h+ic3h5co=ic3h6co | 1.63E+13 | 0.3 | 0.0 |
| 116. | ZS(3)=>c6h10-13d4m+co+c3h5-t | 4.90E+13 | 0.4 | 24447.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 117. | mcps2dt=mcpts2d+h | 1.02E+04 | 3.0 | 30301.1 | 169. | ch3+S(2244)=ic3h6co | 2.49E+14 | -0.5 | 0.0 |
| 118. | mcps2dt=ch2-cyc5-3d+h | 1.59E+10 | 1.3 | 39235.4 | 170. | ho2+ic3h5co=o2+ic3h6co | 2.97E-01 | 3.9 | 18605.0 |
| 119. | c6h10-13d4m+oh=ch2o+but3mldt | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 | 171. | h+ic3h6co=h2+ic3h5co | 6.10E+03 | 3.2 | 4317.0 |
| 120. | c6h10-13d4m+oh=ch3coch3+c3h5-a | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 | 172. | o+ic3h6co=oh+ic3h5co | 1.58E-02 | 4.3 | 11251.0 |
| 121. | c6h10-13d4m+oh=c2h3cho+ic3h7 | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 | 173. | oh+ic3h6co=h2o+ic3h5co | 1.21E+01 | 3.7 | -1280.0 |
| 122. | F4(3)=GD(4)+ch3 | 1.90E+13 | 0.8 | 85829.5 | 174. | ho2+ic3h6co=h2o2+ic3h5co | 3.47E-03 | 4.7 | 9780.0 |
| 123. | F4(3)=GD(5) | 1.37E+07 | 1.9 | 24946.9 | 175. | ch3+S(2293)=ic3h5co | 1.40E+05 | 2.1 | 8.1 |
| 124. | F4(3)=GD(6) | 4.30E+09 | 1.2 | 28900.0 | 176. | oh+C7H8O(583)=h2o+C7H7Os | 2.68E+01 | 3.5 | -524.8 |
| 125. | F4(3)=S(376) | 1.25E+16 | -0.5 | 27100.0 | 177. | oh+C7H8O(583)=h2o+C7H7Om | 6.04E+00 | 3.7 | -1280.0 |
| 126. | GD(5)=ch3+GD(13) | 3.83E+15 | -0.4 | 30845.7 | 178. | C7H7Os=GD(28) | 8.88E+06 | 0.9 | 58155.8 |
| 127. | GD(5)=GD(14) | 2.23E+10 | 0.6 | 23739.1 | 179. | GD(28)=co+GD(29) | 7.07E+20 | -2.1 | 31749.3 |
| 128. | GD(5)=GD(15) | 1.94E+14 | 0.1 | 29578.2 | 180. | GD(29)=c3h3+c3h4-p | 4.90E+14 | 1.5 | 27330.1 |
| 129. | GD(6)=co+GD(18) | 1.95E+18 | -1.2 | 16546.1 | 181. | C7H7Om=GD(30) | 2.01E+03 | 1.3 | 30469.2 |
| 130. | S(376)=GD(14) | 7.98E+14 | -0.3 | 26613.8 | 182. | GD(30)=S(2293)+ic4h5 | 4.91E+14 | 2.0 | 53226.1 |
| 131. | S(376)=GD(20) | 3.46E+15 | -0.0 | 12412.6 | 183. | C7H7Om=GD(31) | 2.02E+07 | 0.6 | 40591.5 |
| 132. | GD(15)=co+GD(16) | 1.90E+14 | -0.5 | 3582.1 | 184. | GD(31)=co+GD(32) | 1.22E+20 | -2.1 | 27286.8 |
| 133. | GD(14)=but3mldt+GD(17) | 6.07E+14 | -0.4 | 47535.5 | 185. | GD(32)=c3h3+c3h4-p | 1.24E+11 | 2.3 | 15332.9 |
| 134. | GD(14)+ho2=co+c2h3coch3+but3mldt+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 186. | dipco-2d4j=dipco-24d+h | 4.64E+16 | -0.5 | 48705.0 |
| 135. | GD(16)=isope+ic4h7v | 1.49E+11 | 1.3 | 42869.8 | 187. | dipco-2d4j=ic3h6co+c3h5-t | 2.16E+15 | 0.2 | 51873.0 |
| 136. | GD(16)+ho2=c2h3coch3+but3mldt+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 188. | dipco-24d+oh=>dipco-24dj+h2o | 1.21E+01 | 3.7 | -1280.0 |
| 137. | GD(18)=GD(16) | 8.80E+10 | 0.8 | 25424.5 | 189. | dipco-24dj=c3h5-t+co+c3h4-a | 1.41E+11 | 1.1 | 50375.0 |
| 138. | GD(18)=GD(19) | 2.36E+10 | 1.3 | 25612.7 | 190. | F6(7)=S(32) | 8.75E+18 | -1.2 | 28947.0 |
| 139. | GD(19)=isope+ic4h7v | 5.93E+11 | 0.8 | 44528.9 | 191. | F6(7)=S(305) | 3.70E+13 | 0.1 | 26039.0 |
| 140. | GD(19)+ho2=ic3h5cho+but3mldt+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 192. | F6(7)=ZS(10)+ch3 | 9.25E+13 | -0.1 | 28702.0 |
| 141. | GD(20)=GD(21)+ic3h6co | 1.19E+12 | 1.0 | 54033.3 | 193. | S(32)=S(566) | 1.94E+05 | 2.5 | 32051.0 |
| 142. | GD(21)=c3h4-p+c3h5-a | 4.72E+13 | 0.2 | 21897.3 | 194. | S(32)=ZS(6) | 4.42E+02 | 3.0 | 25145.7 |
| 143. | F5(9)=S(306) | 6.39E+19 | -1.8 | 22481.8 | 195. | S(566)=c6h10-14d4m+ic3h5co | 7.71E+10 | 0.9 | 21528.0 |
| 144. | F5(9)=S(33) | 9.18E+11 | 0.4 | 16522.2 | 196. | S(566)=dipco-24d+c3h5-a | 9.45E+13 | -0.2 | 18863.0 |
| 145. | F5(9)=S(721) | 1.10E-01 | 4.2 | 21839.3 | 197. | S(566)=ZS(22)+ch3 | 5.39E+13 | 0.0 | 28007.0 |
| 146. | S(33)=co+C9H15(38) | 4.65E+17 | -1.2 | 16546.1 | 198. | ZS(6)=dipco-24d+c3h5-a | 1.28E+17 | -0.6 | 31034.0 |
| 147. | S(306)=c2h4+S(260) | 2.43E+13 | 0.1 | 27882.9 | 199. | S(305)=ZS(7)+co | 3.89E+18 | -1.2 | 16546.1 |
| 148. | S(260)=ch3+C7H8O(583) | 3.12E+12 | 0.5 | 28006.4 | 200. | ZS(7)=ZS(8) | 8.19E+07 | 1.7 | 26190.0 |
| 149. | S(260)=S(582) | 3.24E+09 | 1.4 | 28084.5 | 201. | ZS(7)=ZS(9) | 3.06E+03 | 3.0 | 29223.0 |
| 150. | S(260)=GD(25) | 2.83E+02 | 1.6 | 20154.3 | 202. | ZS(8)=isope+ic4h7 | 1.27E+12 | 0.6 | 29288.7 |
| 151. | C9H15(41)=C9H15(38) | 2.32E+36 | -8.1 | 15327.0 | 203. | ZS(9)=isope+ic4h7 | 1.67E+10 | 0.8 | 18770.1 |
| | Rate coefficients at P= 1.00E-01 (atm) | 6.696E+42 | -10.8 | 14880.0 | 204. | ZS(11)=ZS(12) | 3.30E+42 | -7.9 | 42876.0 |
| | Rate coefficients at P= 1.00E+00 (atm) | 4.075E+40 | -9.7 | 15285.0 | 205. | ZS(12)=ZS(13) | 4.52E+11 | 0.3 | 23268.0 |
| | Rate coefficients at P= 1.00E+01 (atm) | 2.318E+36 | -8.1 | 15327.0 | 206. | ZS(13)=c5h6-124d+c3h5-t+co | 6.32E+10 | -0.2 | 57568.0 |
| | Rate coefficients at P= 1.00E+02 (atm) | 7.938E+21 | -3.5 | 10255.0 | 207. | ch3+oh=ch2(s)+h2o | 4.38E+14 | -0.5 | 2931.7 |
| 152. | C9H15(38)=C9H15(392) | 1.60E+07 | 2.1 | 20679.5 | | Rate coefficients at P= 1.32E-03 (atm) | 1.132E+14 | -0.5 | -496.3 |
| 153. | C9H15(392)=c2h4+GD(22) | 2.09E+13 | 0.1 | 36085.2 | | Rate coefficients at P= 1.32E-02 (atm) | 2.234E+14 | -0.5 | -220.4 |
| 154. | GD(22)=c3h4-a+ic4h7v | 6.66E+10 | 1.1 | 36182.5 | | Rate coefficients at P= 1.32E-01 (atm) | 1.160E+15 | -0.7 | 600.5 |
| 155. | GD(22bis)=c2h3+isope | 2.57E+11 | 0.9 | 45027.9 | | Rate coefficients at P= 1.32E+02 (atm) | 6.091E+10 | 0.6 | 2922.8 |
| 156. | GD(22bis)+ho2=c3h5-a+ic3h5cho+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 208. | ch3+oh=h2+ch2o | 2.19E+12 | -0.4 | 3415.4 |
| 157. | GD(22)+o2=ch2o+co+but3mldt | 4.60E+16 | -1.4 | 1010.0 | | Rate coefficients at P= 1.32E-03 (atm) | 3.887E+09 | 0.3 | -1220.7 |
| 158. | C9H15(41)=c3h4-a+GD(23) | 5.21E+15 | -0.3 | 55103.4 | | Rate coefficients at P= 1.32E-02 (atm) | 1.988E+10 | 0.1 | -624.4 |
| 159. | GD(23)=c2h4+ic4h7v | 5.13E+10 | 1.0 | 35946.8 | | Rate coefficients at P= 1.32E-01 (atm) | 2.815E+11 | -0.2 | 498.3 |
| 160. | S(582)=co+GD(22) | 1.22E+20 | -2.1 | 27286.7 | | Rate coefficients at P= 1.32E+02 (atm) | 2.360E+09 | 0.5 | 3791.0 |
| 161. | S(721)=GD(24) | 2.70E+29 | -4.7 | 24898.5 | 209. | ch3+oh=ch2oh+h | 5.53E+11 | 0.5 | 5443.5 |
| 162. | GD(24)=c2h4+GD(25) | 3.76E+06 | 0.5 | 29123.5 | | Rate coefficients at P= 1.32E-03 (atm) | 8.442E+09 | 1.0 | 3230.4 |

| | | | | | | | | | |
|------|--|-----------|-------|---------|-------------|-----------|----------|-------|----------|
| | Rate coefficients at P= 1.32E-02 (atm) | 8.442E+09 | 1.0 | 3230.4 | | | | | |
| | Rate coefficients at P= 1.32E-01 (atm) | 1.006E+10 | 0.9 | 3295.0 | | | | | |
| | Rate coefficients at P= 1.32E+02 (atm) | 2.525E+10 | 0.9 | 6402.1 | | | | | |
| 210. | ch3+oh=ch3o+h | 1.03E+09 | 1.0 | 11969.8 | | | | | |
| | Rate coefficients at P= 1.32E-03 (atm) | 7.893E+08 | 1.1 | 11858.5 | | | | | |
| | Rate coefficients at P= 1.32E-02 (atm) | 7.893E+08 | 1.1 | 11858.5 | | | | | |
| | Rate coefficients at P= 1.32E-01 (atm) | 7.893E+08 | 1.1 | 11858.5 | | | | | |
| | Rate coefficients at P= 1.32E+02 (atm) | 3.073E+09 | 0.9 | 12980.5 | | | | | |
| 211. | c2h3+o2=ch2cho+o | 1.60E+23 | -3.2 | 8697.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 212. | c2h3+o2=ch2cho+o | 6.67E+09 | 0.7 | 778.1 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 213. | c2h3+o2=ch2o+hco | 5.76E+35 | -7.2 | 13430.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 214. | c2h3+o2=ch2o+hco | 2.84E+15 | -1.2 | 1429.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 215. | c2h3+o2=ch2o+h+co | 1.34E+36 | -7.2 | 13430.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 216. | c2h3+o2=ch2o+h+co | 6.64E+15 | -1.2 | 1429.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 217. | c2h3+o2=ch2choo | 4.16E+48 | -11.2 | 16000.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 218. | c2h3+o2=ch2choo | 3.48E+28 | -5.4 | 3636.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 219. | c2h3+o2=c2h2+ho2 | 1.31E+11 | 0.1 | 5872.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 220. | c2h3+o2=c2h2+ho2 | 5.48E+00 | 3.1 | 85.7 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 221. | ch2cho+o2<=>ch2co+ho2 | 7.05E+07 | 1.6 | 25290.0 | | | | | |
| 222. | ch2cho+o2<=>ch2o+co+oh | 8.95E+13 | -0.6 | 10120.0 | | | | | |
| 223. | c3h4-p+h=c2h2+ch3 | 1.72E+14 | -0.0 | 7134.0 | | | | | |
| 224. | c3h4-a+h=c2h2+ch3 | 1.68E+16 | -0.6 | 14754.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 225. | c3h4-a+h=c2h2+ch3 | 3.31E+08 | 1.1 | 8886.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 226. | c2h2+ch3=c3h5-s | 6.02E+43 | -9.7 | 20561.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 227. | c2h2+ch3=c3h5-s | 3.03E+32 | -7.0 | 12357.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 228. | c3h4-a=c3h4-p | 4.79E+48 | -10.0 | 88685.0 | | | | | |
| 229. | c3h4-a+h=c3h5-t | 7.95E+51 | -11.8 | 18286.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 230. | c3h4-a+h=c3h5-t | 2.59E+35 | -7.6 | 7147.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 231. | c3h4-a+h=c3h5-a | 3.75E+48 | -10.3 | 22511.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 232. | c3h4-a+h=c3h5-a | 2.29E+26 | -4.3 | 6163.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 233. | c3h4-a+h=c3h4-p+h | 2.35E+25 | -3.2 | 13165.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 234. | c3h4-a+h=c3h4-p+h | 1.74E+07 | 2.0 | 4521.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 235. | c3h4-p+h=c3h5-t | 9.51E+51 | -11.7 | 18331.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 236. | c3h4-p+h=c3h5-t | 6.81E+34 | -7.3 | 6722.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 237. | c3h4-p+h=c3h5-s | 3.88E+50 | -11.9 | 16915.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 238. | c3h4-p+h=c3h5-s | | | | | | 4.33E+40 | -9.6 | 9401.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 239. | c3h5-a+c3h5-a=c3h4-a+c3h6 | | | | | | 4.07E+28 | -5.5 | 7410.0 |
| 240. | c3h6+oh=proloh-2 | | | | | | 5.03E+53 | -12.2 | 22976.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 241. | c3h6+oh=proloh-2 | | | | | | 4.28E+41 | -9.3 | 8921.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 242. | c3h6+oh=pro2oh-1 | | | | | | 5.03E+53 | -12.2 | 22976.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 243. | c3h6+oh=pro2oh-1 | | | | | | 4.28E+41 | -9.3 | 8921.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 244. | c3h6+oh=proloh2d+h | | | | | | 1.25E+23 | -2.7 | 20993.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 245. | c3h6+oh=proloh2d+h | | | | | | 3.66E+05 | 2.1 | 10410.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 246. | c3h6+oh=c2h3oh+ch3 | | | | | | 2.27E-02 | 4.0 | 1952.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 247. | c3h6+oh=c2h3oh+ch3 | | | | | | 2.42E+19 | -1.7 | 13107.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 248. | c3h6+oh=proloh1d+h | | | | | | 4.51E+19 | -1.9 | 15763.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 249. | c3h6+oh=proloh1d+h | | | | | | 3.40E-02 | 3.9 | 4390.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 250. | c3h6+oh=pro2oh1d+h | | | | | | 1.47E-05 | 4.8 | 2168.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 251. | c3h6+oh=pro2oh1d+h | | | | | | 2.64E+15 | -0.8 | 12728.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 252. | c3h6+oh=ch3cho+ch3 | | | | | | 5.13E+18 | -2.1 | 12359.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 253. | c3h6+oh=ch3cho+ch3 | | | | | | 7.59E-06 | 4.5 | -680.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 254. | c3h6+h=c2h4+ch3 | | | | | | 4.38E+15 | -0.5 | 7824.4 |
| 255. | c2h3+c2h2=c4h4+h | | | | | | 4.90E+16 | -1.1 | 11800.0 |
| 256. | c2h3+c2h2=ic4h5 | | | | | | 5.10E+53 | -12.6 | 28800.0 |
| 257. | c2h3+c2h3=ic4h5+h | | | | | | 1.20E+22 | -2.4 | 13654.0 |
| 258. | c2h3+c2h3=nc4h5+h | | | | | | 2.40E+20 | -2.0 | 15361.0 |
| 259. | c4h6=ic4h5+h | | | | | | 5.70E+36 | -6.3 | 112353.0 |
| 260. | c4h6=nc4h5+h | | | | | | 5.30E+44 | -8.6 | 123608.0 |
| 261. | c4h4+h=ic4h5 | | | | | | 1.50E+48 | -10.6 | 18800.0 |
| 262. | nc4h3+h=c2h2+h2cc | | | | | | 6.30E+25 | -3.3 | 10014.0 |
| 263. | ic4h3+h=c2h2+h2cc | | | | | | 2.80E+23 | -2.5 | 10780.0 |
| 264. | nc4h3+h=c4h4 | | | | | | 2.00E+47 | -10.3 | 13070.0 |
| 265. | nc4h3=ic4h3 | | | | | | 4.10E+43 | -9.5 | 53000.0 |
| 266. | nc4h3+h=ic4h3+h | | | | | | 2.50E+20 | -1.7 | 10800.0 |
| 267. | h+o2<=>o+oh | | | | | | 1.17E+16 | -0.6 | 16200.0 |
| 268. | o+h2<=>h+oh | | | | | | 5.08E+04 | 2.7 | 6292.0 |
| 269. | oh+h2<=>h+h2o | | | | | | 4.38E+13 | 0.0 | 6990.0 |
| 270. | o+h2o<=>oh+oh | | | | | | 2.97E+06 | 2.0 | 13400.0 |
| 271. | h2+M<=>h+h+M | | | | | | 4.58E+19 | -1.4 | 104400.0 |
| | h2 | | | | Enhanced by | 2.500E+00 | | | |
| | h2o | | | | Enhanced by | 1.200E+01 | | | |
| | co | | | | Enhanced by | 1.900E+00 | | | |
| | co2 | | | | Enhanced by | 3.800E+00 | | | |
| | he | | | | Enhanced by | 8.300E-01 | | | |
| 272. | o+o+M<=>o2+M | | | | | | 6.16E+15 | -0.5 | 0.0 |
| | h2 | | | | Enhanced by | 2.500E+00 | | | |
| | h2o | | | | Enhanced by | 1.200E+01 | | | |
| | ar | | | | Enhanced by | 8.300E-01 | | | |

| | | | | | | | | | |
|------|------------------------------------|-------------|--------------|-------------|-------------|--|----------|------|---------|
| 520. | c2h4+ch3o=c2h3+ch3oh | 1.20E+11 | 0.0 | 6750.0 | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 9000.0 | | | | | |
| 521. | c2h4+ho2=c2h3+h2o2 | 4.80E+04 | 2.5 | 27622.0 | | | | | |
| 522. | c2h3+ho2=>ch3+co+oh | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 523. | c2h3+oh=c2h2+h2o | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 524. | c2h3+h=c2h2+h2 | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 525. | c2h3+o=ch3+co | 1.50E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 526. | c2h3+o=ch2co+h | 1.50E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 527. | c2h3+ch=c2h2+c2h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 528. | c2h3+ch2=c3h4-a+h | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 529. | c2h3+ch3=c2h2+ch4 | 3.91E+11 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 530. | c2h3+c2h6=c2h4+c2h5 | 1.50E+13 | 0.0 | 10000.0 | | | | | |
| 531. | c2h3+c2h=c2h2+c2h2 | 9.64E+11 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 532. | c2h3+hco=c2h4+co | 9.03E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 533. | c2h3+ch2o=c2h4+hco | 3.45E+13 | -0.7 | 6944.3 | | | | | |
| 534. | c2h3+c2h3=c2h2+c2h4 | 1.08E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 535. | c2h3+ch2oh=c2h4+ch2o | 3.01E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 536. | c2h3+ch3o=c2h4+ch2o | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 537. | 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 | | | | |
| 538. | c2h2+o2=hcco+oh | 2.00E+08 | 1.5 | 30100.0 | | | | | |
| 539. | c2h2+o2=c2h+ho2 | 1.21E+13 | 0.0 | 74520.0 | | | | | |
| 540. | c2h2+ho2=ch2co+oh | 6.09E+09 | 0.0 | 7948.0 | | | | | |
| 541. | c2h2+oh=c2h+h2o | 3.40E+07 | 2.0 | 14000.0 | | | | | |
| 542. | c2h2+oh=ch3+co | 4.84E-04 | 4.0 | -2000.0 | | | | | |
| 543. | c2h2+oh=ch2co+h | 2.19E-04 | 4.5 | -1000.0 | | | | | |
| 544. | c2h2+oh=hcco+h | 5.06E+05 | 2.3 | 13500.0 | | | | | |
| 545. | c2h2+o=ch2+co | 1.98E+04 | 2.6 | 656.0 | | | | | |
| 546. | c2h2+o=hcco+h | 4.62E+04 | 2.6 | 656.0 | | | | | |
| 547. | c2h2+ch3=c2h+ch4 | 1.80E+11 | 0.0 | 17290.0 | | | | | |
| 548. | c2h2+h(+m)=c2h3(+m) | 1.70E+10 | 1.3 | 2709.0 | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.63460E+32 | -0.46640E+01 | 0.37800E+04 | | | | | |
| | TROE centering: | 0.78780E+00 | -0.10212E+05 | 0.10000E-29 | | | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | | | | |
| 549. | c2h2(+M)=h2cc(+m) | 8.00E+14 | -0.5 | 50750.0 | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.24500E+16 | -0.64000E+00 | 0.49700E+05 | | | | | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | | | | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | | | | | | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | | | | |
| | c2h2 | Enhanced by | 2.500E+00 | | | | | | |
| | c2h4 | Enhanced by | 2.500E+00 | | | | | | |
| 550. | h2cc+h=c2h2+h | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 551. | h2cc+oh=ch2co+h | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 552. | h2cc+o2=hco+hco | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 553. | h2cc+o2=ch2+co2 | 3.30E+12 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 554. | h2cc+c2h2(+M)=c4h4(+M) | 3.50E+05 | 2.1 | -2400.0 | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.14000E+61 | -0.12599E+02 | 0.74170E+04 | | | | | |
| | TROE centering: | 0.98000E+00 | 0.56000E+02 | 0.58000E+03 | 0.41640E+04 | | | | |
| 555. | c2h4+ch2(s)=h2cc+ch4 | | | | | | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 556. | c2h+h2=c2h2+h | | | | | | 4.45E+06 | 2.2 | 920.0 |
| 557. | c2h+oh=hcco+h | | | | | | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 558. | c2h+o=co+ch | | | | | | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 559. | c2h+o2=co+co+h | | | | | | 1.80E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 560. | 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 | | | | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | | | | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | | | | | | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | | | | |
| | ar | Enhanced by | 7.000E-01 | | | | | | |
| 561. | c2h4o1,2=ch4+co | | | | | | 1.21E+13 | 0.0 | 57200.0 |
| 562. | c2h4o1,2+o2=c2h3o1,2+ho2 | | | | | | 4.00E+13 | 0.0 | 61500.0 |
| 563. | c2h4o1,2+h=c2h3+h2o | | | | | | 5.00E+09 | 0.0 | 5000.0 |
| 564. | c2h4o1,2+h=c2h4+oh | | | | | | 9.51E+10 | 0.0 | 5000.0 |
| 565. | c2h4o1,2+o=c2h3o1,2+oh | | | | | | 1.91E+12 | 0.0 | 5250.0 |
| 566. | c2h4o1,2+ch3=ch4+c2h3o1,2 | | | | | | 1.07E+12 | 0.0 | 11830.0 |
| 567. | c2h4o1,2<=>ch3+hco | | | | | | 3.63E+13 | 0.0 | 57200.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 1.01E+04 | 1.5 | -2750.0 |
| | c2h4o1,2<=>ch3cho | | | | | | 7.41E+12 | 0.0 | 53800.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 9.01E+10 | 0.2 | 80800.0 |
| 569. | c2h4o1,2+oh<=>c2h3o1,2+h2o | | | | | | 1.78E+13 | 0.0 | 3610.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 1.35E+10 | 0.7 | 24740.0 |
| 570. | c2h4o1,2+h<=>c2h3o1,2+h2 | | | | | | 8.00E+13 | 0.0 | 9680.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 5.71E+09 | 0.8 | 15920.0 |
| 571. | c2h4o1,2+ho2<=>c2h3o1,2+h2o2 | | | | | | 1.13E+13 | 0.0 | 30430.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 4.67E+11 | 0.1 | 20670.0 |
| 572. | c2h4o1,2+ch3o=c2h3o1,2+ch3oh | | | | | | 1.20E+11 | 0.0 | 6750.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 3.61E+09 | -0.9 | 25480.0 |
| 573. | c2h4o1,2+ch3o2<=>c2h3o1,2+ch3o2h | | | | | | 1.13E+13 | 0.0 | 30430.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 9.08E+12 | -0.3 | 19070.0 |
| 574. | c2h4o1,2+c2h5o2<=>c2h3o1,2+c2h5o2h | | | | | | 1.13E+13 | 0.0 | 30430.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | 9.09E+12 | -0.3 | 19080.0 |
| 575. | c2h5o2+ch3=ch3ch2o+ch3o | | | | | | 8.17E+12 | 0.0 | -906.0 |
| 576. | c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2 | | | | | | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 577. | c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+hco | | | | | | 1.99E+12 | 0.0 | 11660.0 |
| 578. | c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h | | | | | | 2.23E+12 | 0.0 | 17190.0 |
| 579. | ch4+c2h5o2=ch3+c2h5o2h | | | | | | 1.81E+11 | 0.0 | 18480.0 |
| 580. | ch3o2+c2h5o2=o2+ch3o+ch3ch2o | | | | | | 7.74E+10 | 0.0 | -61.0 |
| 581. | c2h5o2+c2h5o2=ch3ch2o+ch3ch2o+o2 | | | | | | 7.74E+10 | 0.0 | -61.0 |
| 582. | c2h5o2+c2h5o2=c2h5oh+ch3cho+o2 | | | | | | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 583. | c3h6+c2h5o2=c3h5-a+c2h5o2h | | | | | | 3.24E+11 | 0.0 | 14900.0 |
| 584. | c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7 | | | | | | 1.70E+13 | 0.0 | 20460.0 |
| 585. | c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7 | | | | | | 2.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| 586. | c4h8-1+c2h5o2=c4h713+c2h5o2h | | | | | | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 |
| 587. | c2h5o2h+o=oh+c2h5o2 | | | | | | 2.00E+13 | 0.0 | 4750.0 |

| | | | | |
|------|--|-------------|-------------|---------|
| 588. | c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o | 2.00E+12 | 0.0 | -370.0 |
| 589. | c2h5o2h+h=ch3cho+oh+h2 | 3.20E+13 | 0.0 | 7700.0 |
| 590. | c2h5o2h+ch3=ch3cho+oh+ch4 | 5.70E+11 | 0.0 | 8700.0 |
| 591. | c2h5o2h+c2h5=ch3cho+oh+c2h6 | 3.40E+11 | 0.0 | 11400.0 |
| 592. | c2h5o2h+oh=ch3cho+oh+h2o | 5.90E+12 | 0.0 | 900.0 |
| 593. | c2h5o2h+hco=ch3cho+oh+ch2o | 1.80E+12 | 0.0 | 16700.0 |
| 594. | c2h5o2h+ch3o=ch3cho+oh+ch3oh | 6.30E+11 | 0.0 | 5500.0 |
| 595. | c2h5o2h+ho2=ch3cho+oh+h2o2 | 8.00E+11 | 0.0 | 16200.0 |
| 596. | c2h5o2h=ch3ch2o+oh | 6.31E+14 | 0.0 | 42300.0 |
| 597. | ch3cho (+M)=ch3+hco (+M) | 2.72E+22 | -1.7 | 86355.0 |
| | Low pressure limit: 0.95600E+83 -0.18129E+02 | 0.10623E+06 | | |
| | TROE centering: 0.60000E+00 0.10000E+01 | 0.10000E+01 | 0.34441E+04 | |
| 598. | ch3cho=ch3co+h | 5.00E+14 | 0.0 | 87900.0 |
| 599. | ch3cho=ch4+co | 1.00E+15 | 0.0 | 85000.0 |
| 600. | ch3cho=ch2co+h2 | 3.00E+14 | 0.0 | 84000.0 |
| 601. | ch3cho+o2=ch3co+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 39150.0 |
| 602. | ch3cho+h=ch3co+h2 | 6.90E+05 | 2.4 | 1905.0 |
| 603. | ch3cho+h=ch2cho+h2 | 3.15E+05 | 2.5 | 8041.0 |
| 604. | ch3cho+o=ch3co+oh | 5.85E+12 | 0.0 | 1808.0 |
| 605. | ch3cho+o=ch2cho+oh | 1.50E+13 | 0.0 | 5000.0 |
| 606. | ch3cho+oh=ch3co+h2o | 2.69E+08 | 1.4 | -1573.7 |
| 607. | ch3cho+oh=ch2cho+h2o | 6.06E-01 | 3.9 | -1608.0 |
| 608. | ch3cho+ho2=ch3co+h2o2 | 2.78E-03 | 4.5 | 4829.0 |
| 609. | ch3cho+ho2=ch2cho+h2o2 | 5.43E-02 | 4.1 | 18648.0 |
| 610. | ch3cho+ch3=ch3co+ch4 | 1.55E+00 | 3.7 | 4564.0 |
| 611. | ch3cho+ch3=ch2cho+ch4 | 1.44E+00 | 3.7 | 8857.0 |
| 612. | ch3cho+ch3o=ch3co+ch3oh | 1.69E+05 | 2.0 | 2353.2 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 613. | ch3cho+ch3o=ch3co+ch3oh | 9.62E+03 | 2.5 | 158.9 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 614. | ch3cho+ch3o=ch2cho+ch3oh | 2.65E+01 | 3.5 | 5873.3 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 615. | ch3cho+ch3o=ch2cho+ch3oh | 5.64E-06 | 4.9 | 627.7 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 616. | ch3cho+ch3o2=ch3co+ch3o2h | 3.22E-01 | 3.9 | 9503.1 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 617. | ch3cho+ch3o2=ch3co+ch3o2h | 4.99E-06 | 5.0 | 5268.2 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 618. | ch3cho+ch3o2=ch2cho+ch3o2h | 8.23E-03 | 4.3 | 16817.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 619. | ch3cho+ch3o2=ch2cho+ch3o2h | 7.08E-09 | 5.7 | 11699.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 620. | ch3cho+ch3co3=ch2cho+ch3co3h | 2.54E-03 | 4.4 | 13426.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 621. | ch3cho+ch3co3=ch2cho+ch3co3h | 3.60E-11 | 6.2 | 7350.8 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 622. | ch3cho+ch3co3=ch3co+ch3co3h | 1.92E+00 | 3.6 | 5641.9 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 623. | ch3cho+ch3co3=ch3co+ch3co3h | 9.81E-04 | 4.3 | 2636.1 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 624. | ch3co+o=ch3+co2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 625. | ch3co+oh=ch3+co+oh | 3.16E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 626. | ch3co+ho2=ch3+co2+oh | 3.16E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 627. | ch3cho+oh=ch3cooh+h | 1.00E+08 | 1.2 | -447.0 |
| 628. | ch3co=ch3+co | 8.18E+19 | -2.5 | 17263.1 |
| 629. | ch3co+o2=ch3co3 | 1.20E+11 | 0.0 | -1100.0 |
| 630. | ch3co3+ho2=ch3co3h+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| 631. | ch3co3h=ch3co2+oh | 5.01E+14 | 0.0 | 40150.0 |

| | | | | |
|------|---------------------------------|----------|-------|----------|
| 632. | ch3co2+m=ch3+co2+m | 4.40E+15 | 0.0 | 10500.0 |
| 633. | ch3co2+h=ch2co+h2o | 1.00E+04 | 0.0 | 0.0 |
| 634. | ch3co2+ho2=ch3cooh+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 |
| 635. | ch3co3=>ch2co+ho2 | 3.34E+09 | 1.0 | 32500.0 |
| 636. | ch3co3h=>ch3+co2+oh | 1.00E+15 | 0.0 | 37400.0 |
| 637. | ch3co3+ho2=>ch3+co2+o2+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 638. | ch3co3+ch3o2=>o2+ch3+co2+ch3o | 9.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 639. | ch3co3+ch3o2=>o2+ch3cooh+ch2o | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 640. | ch3co3+ch3co3=>2co2+2ch3+o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 641. | ch3co+h=ch2co+h2 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.27E+09 | 0.0 | 83040.0 |
| 642. | ch3co+o=ch2co+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.27E+09 | 0.0 | 83040.0 |
| 643. | ch3co+ch3=ch2co+ch4 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.27E+09 | 0.0 | 83040.0 |
| 644. | ch3cooh=>ch3co2+h | 2.30E+14 | 0.0 | 106345.3 |
| 645. | ch3+hoco+m=ch3cooh+m | 1.00E+22 | -2.0 | 0.0 |
| 646. | ch3co+oh+m=ch3cooh+m | 1.00E+22 | -2.0 | 0.0 |
| 647. | ch3cooh=ch2c (oh) 2 | 5.54E+12 | 0.0 | 68900.0 |
| 648. | ch2c (oh) 2=ch2co+h2o | 1.04E+13 | 0.0 | 45100.0 |
| 649. | ch3cooh=ch4+co2 | 1.26E+22 | -2.5 | 76727.8 |
| 650. | ch3cooh=ch3+hoco | 1.26E+48 | -9.2 | 110207.9 |
| 651. | ch3cooh=h2o+ch2co | 2.22E+21 | -2.2 | 77783.2 |
| 652. | ch3cooh=h+ch2cooh | 8.51E+52 | -11.2 | 119545.0 |
| 653. | ch3cooh+o2=ch2cooh+ho2 | 6.71E+05 | 2.3 | 50638.9 |
| 654. | ch3cooh+h=ch2cooh+h2 | 1.99E+03 | 3.0 | 5794.4 |
| 655. | ch3cooh+h=ch3+co2+h2 | 2.14E+09 | 1.3 | 16754.8 |
| 656. | ch3cooh+o=ch2cooh+oh | 2.30E+04 | 2.9 | 7040.0 |
| 657. | ch3cooh+o=ch3co2+oh | 8.50E+05 | 2.1 | 9880.0 |
| 658. | ch3cooh+oh=ch2cooh+h2o | 1.90E+01 | 3.5 | -196.3 |
| 659. | ch3cooh+oh=ch3+co2+h2o | 5.37E+00 | 3.4 | -761.3 |
| 660. | ch3cooh+ch3=ch2cooh+ch4 | 8.69E+01 | 3.2 | 8175.1 |
| 661. | ch3cooh+ch3=ch3+co2+ch4 | 2.94E+04 | 2.3 | 13465.2 |
| 662. | ch3cooh+ho2=ch2cooh+h2o2 | 2.28E-01 | 3.8 | 17550.0 |
| 663. | ch3cooh+ho2=ch3+co2+h2o2 | 8.90E+03 | 2.3 | 23111.9 |
| 664. | ch3cooh+ch3o2=ch2cooh+ch3o2h | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 665. | ch3cooh+ch3o=ch2cooh+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 666. | ch2c (oh) 2+h=ch3+hcooh | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 667. | ch2c (oh) 2+o=ch2oh+hoco | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 668. | ch2c (oh) 2+oh=ch3oh+hoco | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 669. | ch2cooh+h=ch2co+h2o | 5.25E+26 | -3.9 | 12089.4 |
| 670. | ch2cooh+h=co2+ch4 | 6.62E+26 | -4.1 | 11345.5 |
| 671. | ch2cooh+h=hoco+ch3 | 9.09E+25 | -3.4 | 14494.4 |
| 672. | ch2cooh=ch2co+oh | 4.37E+39 | -7.6 | 64434.7 |
| 673. | ch2cooh=ch3+co2 | 5.62E+28 | -4.8 | 49689.7 |
| 674. | hoco=co+oh | 1.19E+14 | 0.1 | 36460.0 |
| 675. | hoco=co2+h | 8.22E+11 | 0.4 | 35340.0 |
| 676. | ch2cho+o=ch2o+hco | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 677. | ch2cho+ho2=ch2o+hco+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 678. | ch2cho+oh=ch2co+h2o | 1.00E+13 | 0.0 | 2000.0 |
| 679. | ch2cho+h=ch2co+h2 | 2.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 680. | ch2cho+h=ch3co+h | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 681. | ch2cho+h=ch3+hco | 9.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 682. | ch2cho+ch3=>c2h5+co+h | 4.90E+14 | -0.5 | 0.0 |
| 683. | ch2cho=ch3co | 1.00E+13 | 0.0 | 47100.0 |
| 684. | ch2cho=ch2co+h | 3.46E+36 | -6.9 | 52979.4 |
| 685. | ch2cho=ch3+co | 2.15E+35 | -6.8 | 49547.8 |
| 686. | ch2+co (+M) <=>ch2co (+M) | 8.10E+11 | 0.5 | 4510.0 |

Low pressure limit: 0.26900E+34 -0.51100E+01 0.70950E+04
 TROE centering: 0.59070E+00 0.27500E+03 0.12260E+04 0.51850E+04
 h2 Enhanced by 2.000E+00
 h2o Enhanced by 6.000E+00
 ch4 Enhanced by 2.000E+00
 co Enhanced by 1.500E+00
 co2 Enhanced by 2.000E+00
 c2h6 Enhanced by 3.000E+00
 ar Enhanced by 7.000E-01
 687. ch2co+o2=ch2o+co2 2.00E+13 0.0 61500.0
 688. ch2co+ho2=>ch2o+co+oh 6.00E+11 0.0 12738.0
 689. ch2co+h=hcco+h2 1.00E+14 0.0 12300.0
 690. ch2co+h=ch3co 2.30E+08 1.6 2627.0
 691. ch2co+o=hco+hco 1.80E+11 0.0 1350.0
 692. ch2co+o=hco+hco 1.80E+11 0.0 1350.0
 693. ch2co+o=ch2o+co 3.60E+11 0.0 1350.0
 694. ch2co+o=ch2+co2 1.08E+12 0.0 1350.0
 695. ch2co+o=hcco+oh 1.87E+14 0.0 16690.0
 696. ch2co+c2h3=c3h5-a+co 1.00E+12 0.0 3000.0
 697. ch2co+oh=ch2oh+co 2.00E+12 0.0 -1010.0
 698. ch2co+oh=hcco+h2o 1.75E+06 2.0 1698.8
 699. ch2co+oh=ch3+co2 6.98E+08 -1.8 10046.6
 700. ch2co+ch3=hcco+ch4 7.50E+12 0.0 13000.0
 701. ch2co+ch2=c2h4+co 1.00E+12 0.0 0.0
 702. ch2co+ch2=hcco+ch3 3.60E+13 0.0 11000.0
 703. chocho (+M)=ch2o+co (+M) 4.27E+12 0.0 50600.0
 Low pressure limit: 0.89100E+17 0.00000E+00
 704. chocho (+M)=co+co+h2 (+M) 1.07E+14 0.0 55100.0
 Low pressure limit: 0.25700E+17 0.00000E+00
 705. chocho+oh=choco+h2o 1.00E+13 0.0 0.0
 706. chocho+o=choco+oh 7.24E+12 0.0 1970.0
 707. chocho+h=ch2o+hco 1.00E+12 0.0 0.0
 708. chocho+ho2=choco+h2o2 1.70E+12 0.0 10700.0
 709. chocho+ch3=choco+ch4 1.74E+12 0.0 8440.0
 710. chocho+o2=hco+co+ho2 6.30E+13 0.0 30000.0
 711. hco+hco=chocho 1.00E+13 0.0 0.0
 712. choco=hco+co 2.00E+07 0.0 0.0
 713. choco+o2=co+co+ho2 3.98E+12 0.0 30000.0
 714. c2h3o1,2=ch2co+h 4.96E+13 0.0 14860.0
 715. c2h3o1,2=ch3+co 7.31E+12 0.0 14280.0
 716. c2h3o1,2=ch3co 8.51E+14 0.0 14000.0
 717. c2h3o1,2=ch2cho 8.74E+31 -6.9 14990.0
 718. c2h2oh=ch2co+h 5.00E+15 0.0 28000.0
 719. c2h2oh+h=ch2co+h2 2.00E+13 0.0 4000.0
 720. c2h2oh+o=ch2co+oh 2.00E+13 0.0 4000.0
 721. c2h2oh+oh=ch2co+h2o 1.00E+13 0.0 2000.0
 722. c2h2oh+o2=>hco+co2+h2 4.00E+12 0.0 -250.0
 723. hcco+h=ch2co+h 1.00E+13 0.0 0.0
 724. ch+co (+M)<=>hcco (+M) 5.00E+13 0.0 0.0
 Low pressure limit: 0.26900E+29 -0.37400E+01
 TROE centering: 0.57570E+00 0.23700E+03 0.19360E+04
 h2 Enhanced by 2.000E+00
 h2o Enhanced by 6.000E+00
 ch4 Enhanced by 2.000E+00
 co Enhanced by 1.500E+00
 co2 Enhanced by 2.000E+00
 c2h6 Enhanced by 3.000E+00
 ar Enhanced by 7.000E-01

725. hcco+oh=c2o+h2o 3.00E+13 0.0 0.0
 726. hcco+oh=hco+co+h 1.00E+13 0.0 0.0
 727. hcco+o=co+co+h 1.93E+14 0.0 590.0
 728. hcco+h=ch2 (s) +co 1.50E+14 0.0 0.0
 729. hcco+o2=>oh+co+co 1.91E+11 -0.0 1020.0
 730. hcco+o2=>co2+co+h 4.78E+12 -0.1 1150.0
 731. hcco+ch2=c2h+ch2o 1.00E+13 0.0 2000.0
 732. hcco+ch2=c2h3+co 3.00E+13 0.0 0.0
 733. hcco+ch=c2h2+co 5.00E+13 0.0 0.0
 734. hcco+hcco=c2h2+co+co 1.00E+13 0.0 0.0
 735. hcco+o=ch+co2 2.95E+13 0.0 1113.0
 736. hcco+ch3=c2h4+co 5.00E+13 0.0 0.0
 737. c2o+o2=co+co+o 2.00E+13 0.0 0.0
 738. c2o+oh=co+co+h 2.00E+13 0.0 0.0
 739. c2o+o=co+co 5.00E+13 0.0 0.0
 740. c2o+h=ch+co 5.00E+13 0.0 0.0
 741. c2+o2=co+co 5.00E+13 0.0 0.0
 742. c2+oh=c2o+h 5.00E+13 0.0 0.0
 743. c2+h2=c2h+h 4.00E+05 2.4 1000.0
 744. c2h5oh=c2h4+h2o 4.60E+32 -5.6 76019.0
 745. c2h5oh=ch3+ch2oh 1.60E+58 -12.3 105708.0
 746. c2h5oh=c2h5+oh 2.80E+61 -13.4 113016.0
 747. ch3choh+h=c2h5oh 1.70E+50 -11.0 15896.0
 748. ch3ch2o+h (+M)=c2h5oh (+M) 3.10E+11 0.9 13.0
 Low pressure limit: 0.38000E+52 -0.15550E+02
 749. c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2 0.11101E+05
 750. c2h5oh+o2=ch3choh+ho2 2.00E+13 0.0 52800.0
 751. c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o 1.50E+13 0.0 50150.0
 2.37E+10 0.9 5350.0
 Declared duplicate reaction...
 752. c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o 9.62E+05 1.9 -830.7
 Declared duplicate reaction...
 753. c2h5oh+oh=ch3choh+h2o 6.89E+16 -0.7 13799.2
 Declared duplicate reaction...
 754. c2h5oh+oh=ch3choh+h2o 4.60E+05 2.1 -1778.7
 Declared duplicate reaction...
 755. c2h5oh+oh=ch3ch2o+h2o 7.91E+06 1.6 -461.2
 Declared duplicate reaction...
 756. c2h5oh+oh=ch3ch2o+h2o 1.56E+03 2.9 52.5
 Declared duplicate reaction...
 757. c2h5oh+h=pc2h4oh+h2 5.31E+04 2.8 7495.0
 758. c2h5oh+h=ch3choh+h2 8.79E+04 2.7 2915.0
 759. c2h5oh+h=ch3ch2o+h2 9.46E+02 3.1 8701.0
 760. c2h5oh+o=pc2h4oh+oh 9.69E+02 3.2 4658.0
 761. c2h5oh+o=ch3choh+oh 1.45E+05 2.4 876.0
 762. c2h5oh+o=ch3ch2o+oh 1.46E-03 4.7 1727.0
 763. c2h5oh+ch3=pc2h4oh+ch4 3.30E+02 3.3 12291.0
 764. c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4 1.99E+01 3.4 7635.0
 765. c2h5oh+ch3=ch3ch2o+ch4 2.04E+00 3.6 7722.0
 766. c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2 3.82E-02 4.2 9023.0
 767. c2h5oh+ho2=pc2h4oh+h2o2 1.60E-05 5.1 14870.8
 768. c2h5oh+c2h5=pc2h4oh+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
 769. c2h5oh+c2h5=ch3choh+c2h6 5.00E+10 0.0 10400.0
 770. ch3ch2o (+M)=ch3+ch2o (+M) 6.31E+10 0.9 17098.0
 Low pressure limit: 0.47000E+26 -0.30000E+01
 TROE centering: 0.42600E+00 0.30000E+00 0.16531E+05
 771. ch3ch2o+o2=ch3cho+h2o 4.28E+10 0.0 1100.0
 772. ch3ch2o+h=ch3cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0
 773. ch3ch2o+oh=ch3cho+h2o 1.00E+13 0.0 0.0

| | | | | | | | | | |
|-------|---------------------------|----------|------|---------|-------|---------------------------------|-------------|--------------|-------------|
| 952. | c3h6+o=c2h4+ch2o | 1.46E+05 | 2.4 | -832.6 | 1010. | c3h5-s+h=c3h4-p+h2 | 3.33E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 953. | c3h6+o=ch3chcho+h | 2.34E-03 | 4.9 | -2424.1 | 1011. | c3h5-s+o=>ch2co+ch3 | 1.81E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 954. | c3h6+o=c3h5-a+oh | 1.75E+11 | 0.7 | 5884.0 | 1012. | c3h5-s+ch3=c3h4-p+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 955. | c3h6+o=c3h5-s+oh | 1.20E+11 | 0.7 | 8960.0 | 1013. | c3h5-s+c2h5=c3h4-p+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 956. | c3h6+o=c3h5-t+oh | 6.02E+10 | 0.7 | 7633.0 | 1014. | c3h5-s+c2h3=c3h4-p+c2h4 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 957. | c3h6+h=c3h5-a+h2 | 3.41E+04 | 2.7 | 3793.1 | 1015. | c3h5-t+o2=ch3coch2+o | 1.49E+17 | -1.6 | 8096.0 |
| 958. | c3h6+h=c3h5-s+h2 | 1.86E+04 | 3.0 | 11278.0 | 1016. | c3h5-t+o2=c3h4-a+ho2 | 4.39E+07 | 1.2 | 7305.0 |
| 959. | c3h6+h=c3h5-t+h2 | 3.74E+03 | 3.1 | 8185.2 | 1017. | c3h5-t+o2=ch3co+ch2o | 1.36E+25 | -3.8 | 7614.0 |
| 960. | c3h6+ch3=c3h5-a+ch4 | 4.54E+01 | 3.3 | 7152.0 | 1018. | c3h5-t+ho2=>ch2co+ch3+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 961. | c3h6+ch3=c3h5-s+ch4 | 7.19E+02 | 2.9 | 13913.0 | 1019. | c3h5-t+o=>ch2co+ch3 | 1.81E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 962. | c3h6+ch3=c3h5-t+ch4 | 8.15E+05 | 1.9 | 13790.0 | 1020. | c3h5-t+hco=>co+c3h6 | 9.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 963. | c3h6+c3h6=c3h5-a+nc3h7 | 2.53E+14 | 0.0 | 55173.0 | 1021. | c3h5-t+oh=>ch2co+ch3+h | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 964. | c3h6+c3h6=c3h5-a+ic3h7 | 4.88E+13 | 0.0 | 52304.0 | 1022. | c3h5-t+h=c3h4-p+h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 965. | c3h6+c2h5=c3h5-a+c2h6 | 2.23E+00 | 3.5 | 6640.0 | 1023. | c3h5-t+ch3=c3h4-a+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 966. | c3h6+c2h3=c4h6+ch3 | 7.20E+11 | 0.0 | 5008.0 | 1024. | c3h5-t+ch3=c3h4-p+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 967. | c3h6+hco=c3h5-a+ch2o | 1.08E+07 | 1.9 | 17010.0 | 1025. | c3h5-t+c2h5=c3h4-a+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 968. | c3h5-s+ch2o=c3h6+hco | 5.42E+03 | 2.8 | 5862.0 | 1026. | c3h5-t+c2h3=c3h4-a+c2h4 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 969. | c3h6+c2h3=c3h5-a+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 8000.0 | 1027. | c3h3+h(+m)>=c3h4-a(+m) | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 970. | c3h6+c2h3=c3h5-t+c2h4 | 2.21E+00 | 3.5 | 4682.0 | | Low pressure limit: | 0.22900E+57 | -0.12550E+02 | 0.79340E+04 |
| 971. | c3h6+c2h3=c3h5-s+c2h4 | 2.21E+00 | 3.5 | 4682.0 | | TROE centering: | 0.23400E+00 | 0.33000E+03 | 0.48080E+04 |
| 972. | c3h61oh2oo=ch3cho+ch2o+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 30.0 | 1028. | c3h4-a+o2=c3h3+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 61500.0 |
| 973. | c3h62oh1oo=ch3cho+ch2o+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 30.0 | 1029. | c3h4-a+ho2=c3h3+h2o2 | 1.80E+13 | 0.0 | 19000.0 |
| 974. | c3h5-a+o2=c3h5-ao | 2.43E+39 | -9.0 | 8620.0 | 1030. | c3h4-a+ho2=>ch2co+ch2+oh | 4.00E+12 | 0.0 | 19000.0 |
| 975. | c3h5-a+o2=c2h3cho+oh | 3.36E+05 | 1.8 | 19190.0 | 1031. | c3h4-a+ho2=>c2h3cho+oh | 5.00E+11 | 0.0 | 19000.0 |
| 976. | c3h5-a+o2=c3h4-a+ho2 | 2.06E+04 | 2.2 | 17590.0 | 1032. | c3h4-a+ho2=>c2h2+ch2o+oh | 5.00E+11 | 0.0 | 19000.0 |
| 977. | c3h5-a+o2=c2h2+ch2o+oh | 1.95E+34 | -7.8 | 16490.0 | 1033. | c3h4-a+ho2=>c2h4+co+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 14000.0 |
| 978. | c3h5-a+o2=ch2cho+ch2o | 3.08E+09 | 0.4 | 16910.0 | 1034. | c3h4-a+oh=ch2co+ch3 | 4.47E+20 | -1.9 | 20040.0 |
| 979. | c3h5-a+ho2=c3h5o+oh | 2.93E+15 | -0.7 | 3615.3 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 980. | c3h5-a+ho2=c3h5-ao | 2.79E+37 | -7.9 | 6497.9 | 1035. | c3h4-a+oh=ch2co+ch3 | 1.29E-03 | 4.3 | 1625.0 |
| 981. | c3h5-a+ho2=c2h3cho+h2o | 3.10E+05 | 1.6 | 2677.6 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 982. | c3h5-ao=ch2h3cho+h2o | 2.54E+28 | -5.0 | 49919.4 | 1036. | c3h4-a+oh=c3h3+h2o | 5.05E+05 | 2.4 | 2879.0 |
| 983. | c3h5-ao=ch2h3cho+h2o | 2.39E+36 | -6.5 | 49429.4 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 984. | c3h5o=c2h3+ch2o | 6.50E+29 | -5.4 | 26645.0 | 1037. | c3h4-a+oh=c3h3+h2o | 5.95E+04 | 2.5 | 661.1 |
| 985. | c3h5o=c2h3och2 | 2.42E+28 | -5.2 | 19691.2 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 986. | c3h5o=pc2h4cho | 3.48E+42 | -9.9 | 25297.9 | 1038. | c3h4-a+o=c3h3+oh | 1.65E+05 | 2.2 | 859.0 |
| 987. | c3h5o=c2h3cho+h | 1.76E+28 | -4.9 | 22765.2 | 1039. | c3h4-a+o=c3h4o | 1.64E+25 | -4.6 | 3466.0 |
| 988. | c3h5o=c2h4+hco | 8.42E+25 | -4.4 | 22382.6 | 1040. | c3h4-a+o=ch2co+ch2 | 1.12E+10 | 1.0 | 1154.0 |
| 989. | c2h3och2=c2h3+ch2o | 9.72E+33 | -6.5 | 33002.5 | 1041. | c3h4-a+o=>ch2cco+h+h | 1.41E+08 | 1.6 | 1309.0 |
| 990. | c2h3och2=pc2h4cho | 3.97E+34 | -7.4 | 28116.9 | 1042. | c3h4-a+o=c3h3+hcco | 7.22E+10 | 0.4 | 3045.0 |
| 991. | c2h3och2=c2h3cho+h | 2.17E+34 | -6.6 | 30647.6 | 1043. | c3h4-a+o=c2h3co+h | 1.77E+08 | 1.2 | 1451.0 |
| 992. | c2h3och2=c2h4+hco | 9.72E+37 | -8.0 | 32394.6 | 1044. | c3h4-a+h=c3h3+h2 | 6.62E+03 | 3.1 | 5522.0 |
| 993. | c3h5-a+h=c3h4-a+h2 | 6.03E+12 | 0.0 | 0.0 | 1045. | c3h4-a+ch3=c3h3+ch4 | 6.61E-04 | 5.0 | 8300.0 |
| 994. | c3h5-a+oh=c3h4-a+h2o | 6.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 1046. | c3h4-a+ch3=c2h3+c2h4 | 5.56E+02 | 2.8 | 24060.0 |
| 995. | c2h3+ch3=c3h5-a+h | 1.50E+24 | -2.8 | 18618.0 | 1047. | c3h4-a+c3h5-a=c3h3+c3h6 | 2.00E+11 | 0.0 | 7700.0 |
| 996. | c3h5-a+ch3=c3h4-a+ch4 | 3.01E+12 | -0.3 | -130.0 | | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.64E+19 | -2.7 | 42140.0 |
| 997. | c3h5-a+ch2=c4h6+h | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 1048. | c3h4-a+c2h=c3h3+c2h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 998. | c3h5-a+o=c2h3cho+h | 6.03E+13 | 0.0 | 0.0 | 1049. | c3h4-a+c3h4-a=c2h4+c4h4 | 1.09E+15 | 0.0 | 4809.0 |
| 999. | c3h5-a+hco=c3h6+co | 6.03E+13 | 0.0 | 0.0 | 1050. | c3h4o2h=>c3h4-p+ho2 | 3.16E+11 | 0.0 | 19500.0 |
| 1000. | c3h5-a+ch3o=c3h6+ch2o | 3.01E+13 | 0.0 | 0.0 | 1051. | c3h4o2h=>c3h4-a+ho2 | 3.16E+11 | 0.0 | 19500.0 |
| 1001. | c3h5-a+c2h3=c3h6+c2h2 | 4.82E+12 | 0.0 | 0.0 | 1052. | c3h4o2h=c2h3cho+oh | 3.10E+37 | -10.1 | 28588.0 |
| 1002. | c3h5-a+c2h3=c3h4-a+c2h4 | 2.41E+12 | 0.0 | 0.0 | 1053. | c3h4o2h=c3h4o+oh | 1.49E+41 | -9.5 | 22589.0 |
| 1003. | c3h5-a+c2h5=c3h4-a+c2h6 | 9.64E+11 | 0.0 | -130.0 | 1054. | c3h4o=>c2h3cho | 2.45E+14 | 0.0 | 58485.0 |
| 1004. | c3h5-a+c2h5=c2h4+c3h6 | 2.59E+12 | 0.0 | -130.0 | 1055. | c3h4o+o2=>c3h3o+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 61500.0 |
| 1005. | c3h5-ao+ho2=c3h5-ao+ho2 | 3.37E+12 | 0.0 | 0.0 | 1056. | c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh | 1.00E+12 | 0.0 | 14340.0 |
| 1006. | c3h5-s+o2=ch3cho+hco | 1.49E+22 | -2.9 | 5752.0 | 1057. | c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 17000.0 |
| 1007. | c3h5-s+o2=c2h3cho+oh | 4.24E+18 | -1.9 | 5094.0 | 1058. | c3h4o+oh=>c3h3o+h2o | 4.79E+13 | 0.0 | 5955.0 |
| 1008. | c3h5-s+o2=ch3+chocho | 2.28E+16 | -1.4 | 4628.0 | 1059. | c3h4o+h=>c3h3o+h2 | 2.00E+13 | 0.0 | 8300.0 |
| 1009. | c3h5-s+ho2=>ch2co+ch3+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 1060. | c3h3o=>c2h3co | 8.51E+14 | 0.0 | 14000.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|--|-------------|-------------|----------|--|--|--|--|--|
| 1061. | c3h3o+o2=>hcco+hco+oh | 5.01E+12 | 0.0 | 19192.0 | | | | | |
| 1062. | c3h3+h(+m)=>c3h4-p(+m) | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| | Low pressure limit: 0.16000E+58 -0.12590E+02 | 0.83760E+04 | | | | | | | |
| | TROE centering: 0.24500E+00 0.33000E+03 | 0.37060E+04 | 0.67770E+04 | | | | | | |
| 1063. | c3h4-p+o2=c3h3+ho2 | 2.50E+12 | 0.0 | 51000.0 | | | | | |
| 1064. | c3h4-p+o2=>hcco+oh+ch2 | 1.00E+07 | 1.5 | 30100.0 | | | | | |
| 1065. | c3h4-p+ho2=>c2h4+co+oh | 6.09E+09 | 0.0 | 7948.0 | | | | | |
| 1066. | c3h4-p+oh=c3h3+h2o | 3.87E+05 | 2.3 | 2173.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1067. | c3h4-p+oh=c3h3+h2o | 4.93E+04 | 2.5 | -62.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1068. | c3h4-p+oh=ch2co+ch3 | 1.62E+25 | -3.6 | 16000.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1069. | c3h4-p+oh=ch2co+ch3 | 2.58E+04 | 2.2 | 4381.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1070. | c3h4-p+o=ch2co+ch2 | 6.40E+12 | 0.0 | 2100.0 | | | | | |
| 1071. | c3h4-p+o=c2h3+hco | 3.20E+12 | 0.0 | 2100.0 | | | | | |
| 1072. | c3h4-p+o=hcco+ch3 | 9.18E+12 | 0.0 | 2100.0 | | | | | |
| 1073. | c3h4-p+o=ch2o+c2h2 | 3.20E+11 | 0.0 | 2100.0 | | | | | |
| 1074. | c3h4-p+o=>hcco+ch2+h | 3.20E+12 | 0.0 | 2010.0 | | | | | |
| 1075. | c3h4-p+h=c3h3+h2 | 3.57E+04 | 2.8 | 4821.0 | | | | | |
| 1076. | c3h4-p+ch3=c3h3+ch4 | 2.00E+12 | 0.0 | 7700.0 | | | | | |
| 1077. | c3h4-p+c2h3=c3h3+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 7700.0 | | | | | |
| 1078. | c3h4-p+c2h=c3h3+c2h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1079. | c3h4-p+o=c3h3+oh | 3.44E+04 | 2.2 | 4830.0 | | | | | |
| 1080. | c2h2+ch2=c3h4-p | 4.20E+12 | 0.0 | 6620.0 | | | | | |
| 1081. | c3h4-p+oh=ch3cohch | 5.69E+39 | -8.2 | 14510.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1082. | c3h4-p+oh=ch3cohch | 6.09E+24 | -4.3 | 3734.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1083. | c3h4-p+oh=ch3cchoh | 9.76E+43 | -9.5 | 15070.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1084. | c3h4-p+oh=ch3cchoh | 1.03E+27 | -4.8 | 3902.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1085. | ch3cohch=ch3coch2 | 1.54-102 | 26.1 | -55040.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1086. | ch3cohch=ch3coch2 | 1.06E+47 | -10.9 | 42080.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1087. | ch3cohch=ch3+ch2co | 1.17E+41 | -8.6 | 44710.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1088. | ch3cohch=ch3+ch2co | 5.81E+15 | -1.7 | 29940.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1089. | c3h4-a+oh=ch2cch2oh | 3.26E+39 | -8.1 | 13360.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1090. | c3h4-a+oh=ch2cch2oh | 5.00E+22 | -3.5 | 2109.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1091. | c3h4-a+oh=ch2cohch2 | 1.14E+27 | -4.0 | 11210.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1092. | c3h4-a+oh=ch2cohch2 | 9.63E+19 | -2.6 | 1696.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1093. | ch2cohch2=ch2co+ch3 | 4.36E+31 | -5.5 | 60870.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1094. | ch2cohch2=ch2co+ch3 | 2.66E+10 | 0.1 | 46020.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1095. | ch2chchoh=c2h5+co | 4.10E+30 | -5.5 | 54520.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1096. | ch2chchoh=c2h5+co | 5.67E+17 | -2.7 | 42430.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1097. | ch2chchoh=c2h4+hco | 8.75E+41 | -8.6 | 60680.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1098. | ch2chchoh=c2h4+hco | 5.24E+15 | -1.5 | 43610.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1099. | ch2chchoh=ch3chco+h | 8.40E+35 | -6.8 | 60330.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1100. | ch2chchoh=ch3chco+h | 1.49E+25 | -4.5 | 49740.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1101. | ch2chchoh=c2h3cho+h | 4.68E+32 | -5.7 | 54740.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1102. | ch2chchoh=c2h3cho+h | 3.85E+21 | -3.4 | 43120.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1103. | ch2chchoh=ch2co+ch3 | 3.00E+15 | 0.0 | 98000.0 | | | | | |
| 1104. | ch2chchoh=ch2o+c2h3 | 1.00E+15 | 0.0 | 78000.0 | | | | | |
| 1105. | c3h3+o2=ch2co+hco | 1.70E+05 | 1.7 | 1500.0 | | | | | |
| 1106. | c3h3+ho2=oh+c2h+ch2o | 3.00E+10 | 0.0 | 2900.0 | | | | | |
| 1107. | c3h3+oh=c3h2+h2o | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1108. | c3h3+oh=hco+c2h3 | 1.33E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1109. | c3h3+o=>c2h2+hco | 1.38E+14 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1110. | c3h3+o=c2h3+co | 4.62E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1111. | c3h3+o=c2h+ch2o | 4.62E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1112. | c3h3+o=>c2h2+co+h | 4.62E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1113. | c3h3+h=c3h2+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 3000.0 | | | | | |
| 1114. | c3h3+ch=ic4h3+h | 7.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1115. | c3h3+ch=nc4h3+h | 7.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1116. | c3h3+ch2=c4h4+h | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1117. | hcco+c2h2=c3h3+co | 1.00E+11 | 0.0 | 3000.0 | | | | | |
| 1118. | c3h3+hco=c3h4-a+co | 2.50E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1119. | c3h3+hco=c3h4-p+co | 2.50E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1120. | c3h3+hcco=c4h4+co | 2.50E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1121. | c3h3+ch3=c2h5+c2h | 4.56E+17 | -1.1 | 48730.0 | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | | | | | |
| 1122. | c3h3+c3h4-p=c6h6+h | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1123. | c3h3+c3h4-a=c6h6+h | 7.00E+11 | 0.0 | 12000.0 | | | | | |
| 1124. | ch3+c2h=c3h3+h | 7.00E+11 | 0.0 | 12000.0 | | | | | |
| 1125. | c2h2+ch=c3h3 | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1126. | ch+c2h2=c3h2+h | 3.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1127. | ch+c2h2=c3h2+h | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1128. | c3h2+o2=hcco+h+co | 2.00E+12 | 0.0 | 1000.0 | | | | | |
| 1129. | c3h2+o=c2h2+co | 6.80E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1130. | c3h2+oh=c2h2+hco | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1131. | c3h2+ch=c4h2+h | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1132. | c3h2+ch2=nc4h3+h | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1133. | c3h2+ch3=c4h4+h | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1134. | c3h2+hcco=nc4h3+co | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | |
| 1135. | c3h2+h(+M)=c3h3(+M) | 1.02E+13 | 0.3 | 279.6 | | | | | |
| | Low pressure limit: 0.28000E+31 -0.38600E+01 | 0.33198E+04 | | | | | | | |
| | TROE centering: 0.78200E+00 0.20750E+03 | 0.26630E+04 | 0.60950E+04 | | | | | | |
| | h2 Enhanced by 2.500E+00 | | | | | | | | |
| | h2o Enhanced by 1.200E+01 | | | | | | | | |
| | ar Enhanced by 7.500E-01 | | | | | | | | |
| | h2o2 Enhanced by 1.200E+01 | | | | | | | | |
| 1135. | c2h5cho=c2h5co+h | 5.00E+15 | 0.0 | 85000.0 | | | | | |
| 1136. | c2h5cho=ch3chcho+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 | | | | | |
| 1137. | c2h5cho=pc2h4cho+h | 8.00E+15 | 0.0 | 98000.0 | | | | | |
| 1138. | c2h5cho=c2h5+hco | 6.00E+14 | 0.0 | 79100.0 | | | | | |
| 1139. | c2h5cho=ch2cho+ch3 | 1.00E+17 | 0.0 | 84650.0 | | | | | |
| 1140. | c2h5cho+o2=c2h5co+ho2 | 3.01E+13 | 0.0 | 39150.0 | | | | | |
| 1141. | c2h5cho+o2=ch3chcho+ho2 | 3.97E+13 | 0.0 | 47690.0 | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|-------|-------------------------------------|----------|-------|----------|----------|-----|--|--|--|
| 1142. | c2h5cho+o2=pc2h4cho+ho2 | 1.98E+13 | 0.0 | 50870.0 | | | | | |
| 1143. | c2h5cho+h=c2h5co+h2 | 8.46E+05 | 2.3 | 1545.0 | | | | | |
| 1144. | c2h5cho+h=ch3chcho+h2 | 3.06E+04 | 2.8 | 3473.3 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1145. | c2h5cho+h=ch3chcho+h2 | 5.73E+13 | 0.1 | 10568.9 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1146. | c2h5cho+h=pc2h4cho+h2 | 3.67E+03 | 3.1 | 5343.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1147. | c2h5cho+h=pc2h4cho+h2 | 1.63E+14 | 0.0 | 13674.5 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1148. | c2h5cho+o=c2h5co+oh | 5.85E+12 | 0.0 | 1808.0 | | | | | |
| 1149. | c2h5cho+o=ch3chcho+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 | | | | | |
| 1150. | c2h5cho+o=pc2h4cho+oh | 9.50E+04 | 2.7 | 3716.0 | | | | | |
| 1151. | c2h5cho+oh=c2h5co+h2o | 2.65E+12 | 0.0 | -730.0 | | | | | |
| 1152. | c2h5cho+oh=ch3chcho+h2o | 7.05E+09 | 0.9 | 504.7 | | | | | |
| 1153. | c2h5cho+oh=pc2h4cho+h2o | 1.37E+07 | 1.8 | 868.3 | | | | | |
| 1154. | c2h5cho+ho2=c2h5co+h2o2 | 3.72E-05 | 5.0 | 3504.0 | | | | | |
| 1155. | c2h5cho+ho2=ch3chcho+h2o2 | 6.84E-03 | 4.3 | 14694.0 | | | | | |
| 1156. | c2h5cho+ho2=pc2h4cho+h2o2 | 5.61E-08 | 5.9 | 14091.0 | | | | | |
| 1157. | c2h5cho+ch3=c2h5co+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 | | | | | |
| 1158. | c2h5cho+ch3=ch3chcho+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 | | | | | |
| 1159. | c2h5cho+ch3=pc2h4cho+ch4 | 4.50E-02 | 3.6 | 7154.0 | | | | | |
| 1160. | c2h5cho+hco=c2h5co+ch2o | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 | | | | | |
| 1161. | c2h5cho+ch3o=c2h5co+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 | | | | | |
| 1162. | c2h5cho+ch3o2=c2h5co+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 11920.0 | | | | | |
| 1163. | c2h5cho+c2h5o2=c2h5co+c2h5o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 11920.0 | | | | | |
| 1164. | c2h5cho+c2h3=c2h5co+c2h4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 | | | | | |
| 1165. | c2h5cho+c2h5=c2h5co+c2h6 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 | | | | | |
| 1166. | c2h5co=c2h5+co | 5.82E+31 | -6.2 | 18470.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1167. | c2h5co=c2h5+co | 1.39+151 | -40.3 | 99390.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1168. | pc2h4cho=ch2chchoh | 1.99E+14 | -1.1 | 33940.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1169. | pc2h4cho=ch2chchoh | 1.12E-12 | -8.0 | -26170.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1170. | pc2h4cho=c2h5+co | 9.16E-23 | 8.8 | 12440.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1171. | pc2h4cho=c2h5+co | 2.43E+28 | -5.5 | 37750.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1172. | pc2h4cho=c2h4+hco | 4.16E+39 | -8.1 | 37310.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1173. | pc2h4cho=c2h4+hco | 7.83E+23 | -3.8 | 27220.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1174. | pc2h4cho=ch3chco+h | 7.90E+35 | -7.4 | 51140.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1175. | pc2h4cho=ch3chco+h | 4.00E+19 | -3.0 | 41060.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1176. | pc2h4cho=c2h3cho+h | 2.40E+36 | -7.3 | 45250.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1177. | pc2h4cho=c2h3cho+h | 2.38E+24 | -4.1 | 37530.0 | | | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1178. | pc2h4cho+o2=o2pc2h4cho | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 | | | | | |
| 1179. | o2pc2h4cho+ho2=c3ket13+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 | | | | | |
| 1180. | o2pc2h4cho+h2o2=c3ket13+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 | | | | | |
| 1181. | o2pc2h4cho+ho2=>opc2h4cho+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | | | | | |
| 1182. | o2pc2h4cho+ch3o2=>opc2h4cho+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | | | | | |
| 1183. | opc2h4cho=ch2o+ch2cho | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 | | | | | |
| 1184. | opc2h4cho+o2=choch2cho+ho2 | | | | 8.43E+09 | 0 | | | |
| 1185. | ch3chcho+ho2=ch3chocho+oh | | | | 9.64E+12 | 0 | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | 1.31E+19 | -1 | | | |
| 1186. | ch3chcho+o2=ch3chco+ho2 | | | | 1.81E+11 | 0 | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | 2.31E+13 | -0 | | | |
| 1187. | ch3chcho+o2=c2h3cho+ho2 | | | | 2.72E+11 | 0 | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | | | | 1.46E+14 | -0 | | | |
| 1188. | ch3chcho+o2=>ch3cho+co+oh | | | | 3.62E+12 | 0 | | | |
| 1189. | ch3chco+oh=>ch3choh+co | | | | 2.00E+12 | 0 | | | |
| 1190. | ch3chco+h=>c2h5+co | | | | 4.40E+12 | 0 | | | |
| 1191. | ch3chco+o=>ch3cho+co | | | | 3.20E+12 | 0 | | | |
| 1192. | ch3chcho=pc2h4cho | | | | 1.36E+34 | -6 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1193. | ch3chcho=pc2h4cho | | | | 1.68E+01 | 2 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1194. | ch3chcho=ch2chchoh | | | | 5.94E+23 | -3 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1195. | ch3chcho=ch2chchoh | | | | 8.77E-15 | 6 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1196. | ch3chcho=c2h5+co | | | | 5.14E+23 | -3 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1197. | ch3chcho=c2h5+co | | | | 9.51E+00 | -7 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1198. | ch3chcho=c2h4+hco | | | | 1.25E+47 | -9 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1199. | ch3chcho=c2h4+hco | | | | 5.08E+21 | -3 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1200. | ch3chcho=ch3chco+h | | | | 1.87E+50 | -10 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1201. | ch3chcho=ch3chco+h | | | | 3.68E+29 | -5 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1202. | ch3chcho=c2h3cho+h | | | | 4.14E+47 | -9 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1203. | ch3chcho=c2h3cho+h | | | | 5.82E+24 | -3 | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |
| 1204. | c2h5co3+ho2=c2h5co3h+o2 | | | | 1.75E+10 | 0 | | | |
| 1205. | c2h5co3h=c2h5co2+oh | | | | 5.01E+14 | 0 | | | |
| 1206. | c2h5co2+m=c2h5+co2+m | | | | 4.40E+15 | 0 | | | |
| 1207. | c2h5co3=>ch3chco+ho2 | | | | 5.75E+08 | 1 | | | |
| 1208. | c2h5co3=>c2h4+co+ho2 | | | | 1.48E+08 | 1 | | | |
| 1209. | c2h5co3=>c2h4+co2+oh | | | | 1.48E+08 | 1 | | | |
| 1210. | c2h3+hco=c2h3cho | | | | 1.80E+13 | 0 | | | |
| 1211. | c2h3cho=c2h4+co | | | | 3.90E+14 | 0 | | | |
| 1212. | c2h3cho+o=oh+c2h3co | | | | 5.01E+12 | 0 | | | |
| 1213. | c2h3cho+h=c2h3co+h2 | | | | 1.20E+14 | 0 | | | |
| 1214. | c2h3cho+oh=c2h3co+h2o | | | | 2.35E+10 | 0 | | | |
| 1215. | c2h3cho+ho2=c2h3co+h2o2 | | | | 3.10E+12 | 0 | | | |
| 1216. | c2h3cho+ch3=c2h3co+ch4 | | | | 1.70E+12 | 0 | | | |
| 1217. | c2h3cho+c2h5=c2h3co+c2h6 | | | | 5.01E+10 | 0 | | | |
| 1218. | c2h3cho+c2h3=c2h4+c2h3co | | | | 1.74E+12 | 0 | | | |
| 1219. | c2h3+ch3co=ch3+c2h3co | | | | 1.81E+13 | 0 | | | |
| 1220. | c2h3+ch2o=c2h3cho+h | | | | 1.35E+09 | 0 | | | |
| 1221. | pro2oh=c3h6+h2o | | | | 6.10E+43 | -9 | | | |
| 1222. | pro2oh=ch3choh+ch3 | | | | 6.30E+73 | -17 | | | |
| 1223. | pro2oh+o2=ho2+pro2oh-1 | | | | 6.00E+13 | 0 | | | |
| 1224. | pro2oh+o2=ho2+pro2oh-2 | | | | 1.00E+13 | 0 | | | |
| 1225. | pro2oh+ch3=ic3h7o+ch4 | | | | 1.02E+00 | 3 | | | |
| 1226. | pro2oh+ch3=pro2oh-1+ch4 | | | | 1.08E+03 | 3 | | | |

| | | | | | | | | | |
|-------|--|-------------|-------------|----------|-------|--------------------------------|----------|-------|---------|
| 1227. | pro2oh+ch3=pro2oh-2+ch4 | 6.60E+02 | 2.9 | 5730.0 | 1272. | pro1oh+oh=nc3h7o+h2o | 1.60E+03 | 2.9 | 53.0 |
| 1228. | pro2oh+h=ic3h7o+h2 | 9.46E+02 | 3.1 | 8701.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 1229. | pro2oh+h=pro2oh-1+h2 | 1.06E+05 | 2.8 | 7495.0 | 1273. | pro1oh+oh=pro1oh-1+h2o | 4.56E+03 | 2.8 | -3686.0 |
| 1230. | pro2oh+h=pro2oh-2+h2 | 4.40E+04 | 2.7 | 2915.0 | 1274. | pro1oh+oh=pro1oh-2+h2o | 3.91E+03 | 2.8 | -2061.2 |
| 1231. | pro2oh+o=ic3h7o+oh | 1.46E-03 | 4.7 | 1727.0 | 1275. | pro1oh+oh=pro1oh-3+h2o | 1.37E+07 | 1.8 | 868.3 |
| 1232. | pro2oh+o=pro2oh-1+oh | 1.96E+06 | 2.4 | 4750.0 | 1276. | pro1oh+o=pro1oh-3+oh | 9.81E+05 | 2.4 | 4750.0 |
| 1233. | pro2oh+o=pro2oh-2+oh | 7.25E+04 | 2.5 | 876.0 | 1277. | pro1oh+o=pro1oh-2+oh | 1.44E+05 | 2.6 | 3029.0 |
| 1234. | pro2oh+oh=ic3h7o+h2o | 7.90E+06 | 1.6 | -461.0 | 1278. | pro1oh+o=pro1oh-1+oh | 1.45E+05 | 2.5 | 876.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1279. | pro1oh+o=nc3h7o+oh | 1.46E-03 | 4.7 | 1730.0 |
| 1235. | pro2oh+oh=ic3h7o+h2o | 1.60E+03 | 2.9 | 53.0 | 1280. | pro1oh+ho2=nc3h7o+h2o2 | 6.47E-07 | 5.3 | 10533.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1281. | pro1oh+ho2=pro1oh-1+h2o2 | 2.80E-05 | 5.3 | 8268.0 |
| 1236. | pro2oh+oh=pro2oh-1+h2o | 4.74E+10 | 0.9 | 5350.0 | 1282. | pro1oh+ho2=pro1oh-2+h2o2 | 1.50E-02 | 4.5 | 14706.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1283. | pro1oh+ho2=pro1oh-3+h2o2 | 2.64E-01 | 4.3 | 17265.0 |
| 1237. | pro2oh+oh=pro2oh-1+h2o | 1.92E+06 | 1.9 | -830.7 | 1284. | pro1oh+ch3=nc3h7o+ch4 | 1.02E+00 | 3.6 | 8221.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1285. | pro1oh+ch3=pro1oh-1+ch4 | 2.20E+02 | 3.1 | 7600.0 |
| 1238. | pro2oh+oh=pro2oh-2+h2o | 7.18E+05 | 2.2 | -1537.7 | 1286. | pro1oh+ch3=pro1oh-2+ch4 | 9.20E+02 | 2.9 | 8790.0 |
| 1239. | pro2oh+ho2=ic3h7o+h2o2 | 6.47E-07 | 5.3 | 10533.0 | 1287. | pro1oh+ch3=pro1oh-3+ch4 | 3.00E-01 | 4.0 | 8200.0 |
| 1240. | pro2oh+ho2=pro2oh-1+h2o2 | 3.19E-05 | 5.1 | 14871.0 | 1288. | pro1oh-3=c2h5+ch2o | 1.63E+42 | -8.9 | 47700.0 |
| 1241. | pro2oh+ho2=pro2oh-2+h2o2 | 8.60E+00 | 3.5 | 9732.0 | 1289. | pro1oh-3=c2h4+ch2oh | 9.08E+42 | -9.1 | 48600.0 |
| 1242. | pro2oh+ch3o=pro2oh-1+ch3oh | 3.24E+11 | 0.0 | 7300.0 | 1290. | pro1oh-3=pro1oh2d+h | 6.47E+41 | -8.6 | 46300.0 |
| 1243. | pro2oh+ch3o=pro2oh-2+ch3oh | 2.30E+10 | 0.0 | 2900.0 | 1291. | pro1oh-3=c3h6+oh | 8.30E+40 | -8.8 | 46800.0 |
| 1244. | ic3h7o+o2=ch3coch3+ho2 | 4.28E+10 | 0.0 | 1100.0 | 1292. | pro1oh-3=pro1oh-2 | 5.96E+40 | -8.2 | 43700.0 |
| 1245. | pro2oh-1+o2=pro2oh1d+ho2 | 4.50E+11 | 0.0 | 5000.0 | 1293. | pro1oh-3+o2=pro1oh2d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1246. | pro2oh-2+o2=ch3coch3+ho2 | 1.54E+18 | -1.8 | 1120.0 | 1294. | pro1oh-2=pro1oh1d+h | 4.40E+35 | -7.0 | 43100.0 |
| 1247. | pro2oh-2+o2=pro2oh1d+ho2 | 1.78E+04 | 2.1 | 470.0 | 1295. | pro1oh-2=pro1oh1d+h | 4.52E+35 | -7.1 | 43300.0 |
| 1248. | pro2oh-1=ch3+c2h3oh | 2.83E+36 | -7.1 | 40100.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 1249. | pro2oh-1=pro2oh1d+h | 6.30E+45 | -10.4 | 46160.0 | 1296. | pro1oh-2=pro1oh2d+h | 2.57E+37 | -7.4 | 46700.0 |
| 1250. | pro2oh-2=ch3coch3+h | 3.01E+37 | -7.2 | 42200.0 | 1297. | pro1oh-2+o2=pro1oh2d+ho2 | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1251. | pro2oh-2=pro2oh1d+h | 1.66E+41 | -8.5 | 49400.0 | 1298. | pro1oh-2+o2=pro1oh1d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 1252. | ic3h7o=ch3cho+ch3 | 1.09E+34 | -6.9 | 19200.0 | 1299. | pro1oh-1=pro1oh1d+h | 1.63E+42 | -8.9 | 47700.0 |
| 1253. | ic3h7o=ch3coch3+h | 4.64E+28 | -5.8 | 19200.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 1254. | pro1oh=c3h6+h2o | 3.53E+13 | 0.0 | 67260.0 | 1300. | pro1oh-1=pro1oh1d+h | 9.08E+42 | -9.1 | 48600.0 |
| 1255. | pro1oh (+M) =pc2h4oh+ch3 (+M) | 8.81E+23 | -2.1 | 89820.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| | Low pressure limit: 0.22000E+65 -0.13390E+02 | 0.95330E+05 | | | 1301. | pro1oh-1=c2h5cho+h | 6.47E+41 | -8.6 | 46300.0 |
| | TROE centering: 0.30700E+00 0.11000E+04 | 0.93300E+10 | 0.93300E+10 | | 1302. | pro1oh-1=c2h5+ch2o | 8.30E+40 | -8.8 | 46800.0 |
| 1256. | pro1oh (+M) =c2h5+ch2oh (+M) | 1.73E+26 | -2.7 | 86207.0 | 1303. | pro1oh-1=c2h3oh+ch3 | 5.96E+40 | -8.2 | 43700.0 |
| | Low pressure limit: 0.16770E+90 -0.20364E+02 | 0.99453E+05 | | | 1304. | pro1oh-1+o2=c2h5cho+ho2 | 1.50E+18 | -1.8 | 1120.0 |
| | TROE centering: 0.55845E-02 0.35820E+03 | 0.49325E+08 | 0.24761E+04 | | 1305. | pro1oh-1+o2=pro1oh1d+ho2 | 8.90E+03 | 2.1 | 470.0 |
| 1257. | pro1oh (+M) =nc3h7+oh (+M) | 5.26E+20 | -1.3 | 94630.0 | 1306. | nc3h7o=c2h5cho+h | 1.44E+29 | -5.9 | 22200.0 |
| | Low pressure limit: 0.89200E+58 -0.11780E+02 | 0.99410E+05 | | | 1307. | nc3h7o=c2h5+ch2o | 5.18E+31 | -6.2 | 19100.0 |
| | TROE centering: 0.35500E+00 0.94200E+03 | 0.99200E+10 | 0.99200E+10 | | 1308. | nc3h7o+h=c2h2oh+c2h5 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1258. | pro1oh=pro1oh-3+h | 1.84E+17 | -0.4 | 101200.0 | 1309. | nc3h7o+h=c2h5cho+h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1259. | pro1oh=pro1oh-2+h | 3.52E+18 | -0.7 | 100400.0 | 1310. | nc3h7o+oh=c2h5cho+h2o | 4.82E+14 | 0.0 | 5017.0 |
| 1260. | pro1oh=pro1oh-1+h | 1.78E+16 | -0.2 | 95310.0 | 1311. | nc3h7o+o2=c2h5cho+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 219.0 |
| 1261. | pro1oh=nc3h7o+h | 7.03E+14 | 0.1 | 104900.0 | 1312. | nc3h7o+ho2=c2h5cho+h2o2 | 3.00E+11 | 0.0 | 0.0 |
| 1262. | pro1oh+o2=pro1oh-3+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 52290.0 | 1313. | pro1oh-3=pro1oh-1 | 2.05E+35 | -8.0 | 38670.0 |
| 1263. | pro1oh+o2=pro1oh-2+ho2 | 2.44E+12 | 0.2 | 49760.0 | 1314. | pro1oh-3=nc3h7o | 1.88E+07 | 0.0 | 16680.0 |
| 1264. | pro1oh+o2=pro1oh-1+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 49460.0 | 1315. | pro1oh-2=pro1oh-1 | 1.54E+53 | -13.3 | 44990.0 |
| 1265. | pro1oh+o2=nc3h7o+ho2 | 1.00E+13 | 0.0 | 55000.0 | 1316. | pro1oh-2=nc3h7o | 8.17E+06 | 0.0 | 23290.0 |
| 1266. | pro1oh+h=nc3h7o+h2 | 9.46E+02 | 3.1 | 8701.0 | 1317. | pro1oh-1=nc3h7o | 3.40E+08 | 0.0 | 22970.0 |
| 1267. | pro1oh+h=pro1oh-1+h2 | 8.79E+04 | 2.7 | 2915.0 | 1318. | c3h5-a+oh=pro1oh2d | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1268. | pro1oh+h=pro1oh-2+h2 | 1.08E+05 | 2.7 | 4440.0 | 1319. | pro1oh2d+h=h2+ch2chchoh | 4.10E+05 | 2.5 | 9800.0 |
| 1269. | pro1oh+h=pro1oh-3+h2 | 3.67E+03 | 3.1 | 5343.0 | 1320. | pro1oh2d+oh=h2o+ch2chchoh | 1.00E+06 | 2.0 | 1450.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1321. | pro1oh2d+ch3=ch4+ch2chchoh | 9.80E-01 | 3.5 | 306.0 |
| 1270. | pro1oh+h=pro1oh-3+h2 | 1.63E+14 | 0.0 | 13674.5 | 1322. | pro1oh2d+o=oh+ch2chchoh | 6.00E+10 | 0.7 | 7630.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1323. | pro1oh1d+oh=ch2chchoh+h2o | 2.77E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1271. | pro1oh+oh=nc3h7o+h2o | 7.90E+06 | 1.6 | -461.0 | 1324. | pro1oh1d+h=ch2chchoh+h2 | 5.36E+04 | 2.5 | 8750.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | |

| | | | | |
|-------|--|-------------|-------|----------|
| 1430. | nc4h10+ch2oh=sc4h9+ch3oh | 1.21E+02 | 3.0 | 11980.0 |
| 1431. | nc4h10+ch3o2=pc4h9+ch3o2h | 1.39E+00 | 4.0 | 18280.0 |
| 1432. | nc4h10+ch3o2=sc4h9+ch3o2h | 2.04E+01 | 3.6 | 14810.0 |
| 1433. | nc4h10+c2h3=pc4h9+c2h4 | 1.02E+12 | 0.0 | 18000.0 |
| 1434. | nc4h10+c2h3=sc4h9+c2h4 | 8.00E+11 | 0.0 | 16800.0 |
| 1435. | nc4h10+c2h5=pc4h9+c2h6 | 1.02E+11 | 0.0 | 13400.0 |
| 1436. | nc4h10+c2h5=sc4h9+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 10400.0 |
| 1437. | nc4h10+c3h5-a=pc4h9+c3h6 | 2.40E+02 | 3.3 | 19840.0 |
| 1438. | nc4h10+c3h5-a=sc4h9+c3h6 | 1.60E+02 | 3.3 | 18170.0 |
| 1439. | nc4h10+c4h713=pc4h9+c4h8-1 | 8.00E+01 | 3.3 | 19840.0 |
| 1440. | nc4h10+c4h713=sc4h9+c4h8-1 | 5.33E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 1441. | nc4h10+c4h713=pc4h9+c2c4h8 | 8.00E+01 | 3.3 | 19840.0 |
| 1442. | nc4h10+c4h713=sc4h9+c2c4h8 | 5.33E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 1443. | nc4h10+c4h713=pc4h9+t2c4h8 | 8.00E+01 | 3.3 | 19840.0 |
| 1444. | nc4h10+c4h713=sc4h9+t2c4h8 | 5.33E+01 | 3.3 | 18170.0 |
| 1445. | nc4h10+pc4h9o=pc4h9+pc4h9oh | 3.16E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 1446. | nc4h10+pc4h9o=sc4h9+pc4h9oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1447. | nc4h10+sc4h9o=pc4h9+sc4h9oh | 3.16E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 1448. | nc4h10+sc4h9o=sc4h9+sc4h9oh | 2.19E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1449. | pc4h9=sc4h9 | 3.80E+10 | 0.7 | 36600.0 |
| 1450. | pc4h9=c2h5+c2h4 | 3.58E+12 | 0.5 | 29480.0 |
| 1451. | pc4h9=c4h8-1+h | 2.65E+12 | 0.2 | 35710.0 |
| 1452. | pc4h9+o2=c4h8-1+ho2 | 4.36E+21 | -3.0 | 12330.0 |
| 1453. | pc4h9+ho2=c4h8-1+h2o2 | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1454. | pc4h9+oh=c4h8-1+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1455. | pc4h9+h=c4h8-1+h2 | 1.25E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1456. | pc4h9+ch3=c4h8-1+ch4 | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1457. | pc4h9+c2h5=c4h8-1+c2h6 | 1.60E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1458. | pc4h9+c3h5-a=c4h8-1+c3h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1459. | pc4h9+c4h713=c4h8-1+c4h8-1 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1460. | sc4h9+o=c2h5coch3+h | 4.82E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1461. | sc4h9+o=ch3cho+c2h5 | 4.82E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1462. | pc4h9+o=ch2o+nc3h7 | 4.82E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1463. | pc4h9+o=nc3h7cho+h | 4.82E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1464. | sc4h9=c3h6+ch3 | 4.79E+10 | 1.0 | 30360.0 |
| 1465. | sc4h9=c4h8-1+h | 2.99E+11 | 0.6 | 36820.0 |
| 1466. | sc4h9=t2c4h8+h | 2.85E+11 | 0.3 | 35520.0 |
| 1467. | sc4h9=c2c4h8+h | 2.85E+11 | 0.3 | 35520.0 |
| 1468. | sc4h9+o2=c4h8-1+ho2 | 2.83E+19 | -1.9 | 11110.0 |
| 1469. | sc4h9+o2=t2c4h8+ho2 | 1.68E+25 | -4.3 | 12890.0 |
| 1470. | sc4h9+o2=c2c4h8+ho2 | 8.38E+24 | -4.3 | 12890.0 |
| 1471. | sc4h9+ho2=c4h8-1+h2o2 | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1472. | sc4h9+ho2=t2c4h8+h2o2 | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1473. | sc4h9+ho2=c2c4h8+h2o2 | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1474. | sc4h9+oh=c4h8-1+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1475. | sc4h9+oh=t2c4h8+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1476. | sc4h9+oh=c2c4h8+h2o | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1477. | sc4h9+h=c4h8-1+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1478. | sc4h9+h=t2c4h8+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1479. | sc4h9+h=c2c4h8+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 1480. | sc4h9+ch3=c4h8-1+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1481. | sc4h9+ch3=t2c4h8+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1482. | sc4h9+ch3=c2c4h8+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1483. | c2c4h8=t2c4h8 | 3.62E+13 | 0.0 | 61330.0 |
| 1484. | c2c4h8=c4h6+h2 | 1.00E+13 | 0.0 | 65500.0 |
| 1485. | c2c4h8=c4h713+h | 1.06E+85 | -20.0 | 132787.0 |
| 1486. | c3h5-s+ch3(+)=c2c4h8(+) | 2.50E+13 | 0.0 | 0.0 |
| | Low pressure limit: 0.42700E+59 -0.11940E+02 | 0.97698E+04 | | |

| | | | | |
|-------|---|-------------|-----------|----------------|
| | TROE centering: 0.17500E+00 0.13406E+04 0.60000E+05 0.10140E+05 | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h2 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| | c2h4 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| | ar | Enhanced by | 7.000E-01 | |
| 1487. | c2c4h8=c3h5-a+ch3 | | | 5.00E+15 0.0 |
| 1488. | c2c4h8+o2=c4h713+ho2 | | | 4.20E+12 0.0 |
| 1489. | c2c4h8+h=c4h713+h2 | | | 3.48E+05 2.5 |
| 1490. | c2c4h8+o=c4h713+oh | | | 3.48E+11 0.7 |
| 1491. | c2c4h8+oh=c4h713+h2o | | | 6.00E+06 2.0 |
| 1492. | c2c4h8+ho2=c4h713+h2o2 | | | 1.92E+04 2.6 |
| 1493. | c2c4h8+ch3=c4h713+ch4 | | | 4.44E+00 3.5 |
| 1494. | c2c4h8+o=ch3co+c2h5 | | | 2.17E+05 2.3 |
| 1495. | c2c4h8+o=ch3chcho+ch3 | | | 1.81E+05 2.3 |
| 1496. | c2c4h8+o=ch3cho+c2h4 | | | 3.25E+05 2.3 |
| 1497. | c2c4h8+h=c3h6+ch3 | | | 3.46E+17 -1.1 |
| 1498. | c2c4h8+h=c4h722+h2 | | | 8.20E+05 2.5 |
| 1499. | c2c4h8+o=c4h722+oh | | | 1.20E+11 0.7 |
| 1500. | c2c4h8+oh=c4h722+h2o | | | 2.20E+06 2.0 |
| 1501. | c2c4h8+ch3=c4h722+ch4 | | | 1.96E+00 3.5 |
| 1502. | c2c4h8+ho2=c4h8cy2o3+oh | | | 4.07E+11 0.0 |
| 1503. | t2c4h8=c4h713+h | | | 1.06E+85 -20.0 |
| 1504. | c3h5-s+ch3(+)=t2c4h8(+) | | | 2.50E+13 0.0 |
| | Low pressure limit: 0.42700E+59 -0.11940E+02 | | | 0.97698E+04 |
| | TROE centering: 0.17500E+00 0.13406E+04 0.60000E+05 0.10140E+05 | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h2 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| | c2h4 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| | ar | Enhanced by | 7.000E-01 | |
| 1505. | t2c4h8=c3h5-a+ch3 | | | 5.00E+15 0.0 |
| 1506. | t2c4h8+o2=c4h713+ho2 | | | 4.20E+12 0.0 |
| 1507. | sc4h9+c4h713=t2c4h8+t2c4h8 | | | 4.33E+14 -0.8 |
| 1508. | sc4h9+c4h713=c2c4h8+t2c4h8 | | | 4.33E+14 -0.8 |
| 1509. | sc4h9+c4h713=c2c4h8+c2c4h8 | | | 4.33E+14 -0.8 |
| 1510. | t2c4h8+h=c4h713+h2 | | | 3.48E+05 2.5 |
| 1511. | t2c4h8+o=c4h713+oh | | | 3.48E+11 0.7 |
| 1512. | t2c4h8+oh=c4h713+h2o | | | 6.00E+06 2.0 |
| 1513. | t2c4h8+ho2=c4h713+h2o2 | | | 1.92E+04 2.6 |
| 1514. | t2c4h8+ch3=c4h713+ch4 | | | 4.44E+00 3.5 |
| 1515. | t2c4h8+o=ch3co+c2h5 | | | 2.17E+05 2.3 |
| 1516. | t2c4h8+o=ch3chcho+ch3 | | | 1.81E+05 2.3 |
| 1517. | t2c4h8+o=ch3cho+c2h4 | | | 3.25E+05 2.3 |
| 1518. | t2c4h8+h=c3h6+ch3 | | | 3.46E+17 -1.1 |
| 1519. | t2c4h8+h=c4h722+h2 | | | 8.20E+05 2.5 |
| 1520. | t2c4h8+o=c4h722+oh | | | 1.20E+11 0.7 |
| 1521. | t2c4h8+oh=c4h722+h2o | | | 2.20E+06 2.0 |
| 1522. | t2c4h8+ch3=c4h722+ch4 | | | 1.96E+00 3.5 |
| 1523. | t2c4h8+ho2=c4h8cy2o3+oh | | | 4.07E+11 0.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|----------------------------------|----------|-------|---------|-------|--------------------------------------|----------|------|---------|
| 1808. | pc4h9o=nc3h7+ch2o | 2.67E+11 | 0.0 | 10820.0 | 1866. | sc4h9oh+oh=sc4h8oh-1+h2o | 1.05E+10 | 1.0 | 1590.0 |
| 1809. | pc4h9o=nc3h7cho+h | 4.38E+09 | 0.0 | 16040.0 | 1867. | sc4h9oh+oh=sc4h8oh-3+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 1810. | pc4h8oh-1=nc3h7cho+h | 5.60E+40 | -8.8 | 45060.0 | 1868. | sc4h9oh+ho2=sc4h8oh-1+h2o2 | 1.68E+13 | 0.0 | 20440.0 |
| 1811. | pc4h8oh-1=c2h5+c2h3oh | 3.24E+37 | -7.4 | 39160.0 | 1869. | sc4h9oh+ho2=sc4h8oh-3+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 1812. | pc4h8oh-1=but1en1ol+h | 1.04E+44 | -9.7 | 47660.0 | 1870. | sc4h9oh+ch3=sc4h8oh-1+ch4 | 9.04E-01 | 3.6 | 7154.0 |
| 1813. | pc4h8oh-2=c4h8-1+oh | 2.71E+35 | -7.0 | 33670.0 | 1871. | sc4h9oh+ch3=sc4h8oh-3+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 1814. | pc4h8oh-2=ch3+pro1oh2d | 8.40E+44 | -9.8 | 42470.0 | 1872. | nc3h7cho=nc3h7co+h | 5.00E+15 | 0.0 | 85000.0 |
| 1815. | pc4h8oh-2=but1en1ol+h | 1.26E+46 | -10.4 | 46160.0 | 1873. | nc3h7cho=c3h6cho-2+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 1816. | pc4h8oh-2=but2en1ol+h | 3.47E+50 | -11.9 | 51010.0 | 1874. | nc3h7cho=c3h6cho-3+h | 5.00E+15 | 0.0 | 94990.0 |
| 1817. | pc4h8oh-3=c3h6+ch2oh | 7.14E+41 | -8.8 | 39070.0 | 1875. | nc3h7cho=c3h6cho-4+h | 8.00E+15 | 0.0 | 98000.0 |
| 1818. | pc4h8oh-3=but2en1ol+h | 3.95E+53 | -12.7 | 51400.0 | 1876. | nc3h7cho=>nc3h7+hco | 6.00E+14 | 0.0 | 79100.0 |
| 1819. | pc4h8oh-3=but3en1ol+h | 1.74E+52 | -12.4 | 50630.0 | 1877. | nc3h7cho=pc2h4cho+ch3 | 1.00E+17 | 0.0 | 84650.0 |
| 1820. | pc4h8oh-4=c2h4+pc2h4oh | 1.74E+50 | -11.4 | 40710.0 | 1878. | nc3h7cho=c2h5+ch2cho | 1.58E+17 | 0.0 | 80280.0 |
| 1821. | pc4h8oh-4=but3en1ol+h | 1.19E+57 | -14.0 | 49340.0 | 1879. | nc3h7cho+o2=nc3h7co+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 39150.0 |
| 1822. | pc4h9o+o2=nc3h7cho+ho2 | 4.28E+10 | 0.0 | 1100.0 | 1880. | nc3h7cho+o2=c3h6cho-2+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 1823. | pc4h8oh-1+o2=nc3h7cho+ho2 | 1.50E+18 | -1.8 | 1120.0 | 1881. | nc3h7cho+o2=c3h6cho-3+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 47690.0 |
| 1824. | pc4h8oh-1+o2=but1en1ol+h2o | 8.90E+03 | 2.1 | 470.0 | 1882. | nc3h7cho+o2=c3h6cho-4+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 50870.0 |
| 1825. | pc4h8oh-2+o2=but1en1ol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 1883. | nc3h7cho+h=nc3h7co+h2 | 4.10E+09 | 1.2 | 2405.0 |
| 1826. | pc4h8oh-2+o2=but2en1ol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 1884. | nc3h7cho+h=c3h6cho-2+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 1827. | pc4h8oh-3+o2=but2en1ol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 1885. | nc3h7cho+h=c3h6cho-3+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 1828. | pc4h8oh-3+o2=but3en1ol+h2o | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 | 1886. | nc3h7cho+h=c3h6cho-4+h2 | 9.50E+04 | 2.8 | 6280.0 |
| 1829. | pc4h8oh-4+o2=but3en1ol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 1887. | nc3h7cho+o=nc3h7co+oh | 5.85E+12 | 0.0 | 1808.0 |
| 1830. | but1en1ol+h=but1en1ol3+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 | 1888. | nc3h7cho+o=c3h6cho-2+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 1831. | but1en1ol+h=but1en1ol3+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 1889. | nc3h7cho+o=c3h6cho-3+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 |
| 1832. | but1en1ol+h2o=but1en1ol3+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 | 1890. | nc3h7cho+o=c3h6cho-4+oh | 9.50E+04 | 2.7 | 3716.0 |
| 1833. | but1en1ol+h2o=but1en1ol3+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 | 1891. | nc3h7cho+oh=nc3h7co+h2o | 2.35E+10 | 0.7 | -1113.0 |
| 1834. | but2en1ol+h=but1en1ol3+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 | 1892. | nc3h7cho+oh=c3h6cho-2+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 1835. | but2en1ol+h=but1en1ol3+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 1893. | nc3h7cho+oh=c3h6cho-3+h2o | 4.68E+07 | 1.6 | -35.0 |
| 1836. | but2en1ol+h2o=but1en1ol3+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 | 1894. | nc3h7cho+oh=c3h6cho-4+h2o | 5.25E+09 | 1.0 | 1590.0 |
| 1837. | but2en1ol+h2o=but1en1ol3+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 | 1895. | nc3h7cho+ho2=nc3h7co+h2o2 | 3.10E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| 1838. | but2en1ol+h2o=but2en1ol4+h2 | 1.74E+04 | 2.5 | 2510.0 | 1896. | nc3h7cho+ho2=c3h6cho-2+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 1839. | but2en1ol+h2o=but2en1ol4+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -298.0 | 1897. | nc3h7cho+ho2=c3h6cho-3+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 17690.0 |
| 1840. | but2en1ol+h2o=but2en1ol4+h2o2 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 | 1898. | nc3h7cho+ho2=c3h6cho-4+h2o2 | 8.50E+12 | 0.0 | 20440.0 |
| 1841. | but2en1ol+h2o=but2en1ol4+ch4 | 2.22E+00 | 3.5 | 5670.0 | 1899. | nc3h7cho+ch3=nc3h7co+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 1842. | but3en1ol+h=but2en1ol4+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 | 1900. | nc3h7cho+ch3=c3h6cho-2+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 1843. | but3en1ol+h=but2en1ol4+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 1901. | nc3h7cho+ch3=c3h6cho-3+ch4 | 2.70E+04 | 2.3 | 7287.0 |
| 1844. | but3en1ol+h2o=but2en1ol4+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 | 1902. | nc3h7cho+ch3=c3h6cho-4+ch4 | 4.50E-03 | 3.6 | 7154.0 |
| 1845. | but3en1ol+h2o=but2en1ol4+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 | 1903. | nc3h7cho+hco=nc3h7co+ch2o | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 1846. | but1en1ol=>nc3h7cho | 9.66E+23 | -3.3 | 59987.5 | 1904. | nc3h7cho+ch3o=nc3h7co+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 1847. | but1en1ol3+ho2=c3h3cho+c2h2oh+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 1905. | nc3h7cho+ch3o=c3h6cho-2+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1848. | but2en1ol4+ho2=c2h3cho+c2h2oh+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 1906. | nc3h7cho+ch3o=c3h6cho-3+ch3oh | 1.10E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| 1849. | but2en1ol4=c4h6+oh | 7.40E+12 | 0.0 | 27350.0 | 1907. | nc3h7cho+ch3o=c3h6cho-4+ch3oh | 1.58E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| 1850. | but1en1ol+oh=c2h5cho+ch2oh | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 | 1908. | nc3h7cho+ch3o2=nc3h7co+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 1851. | but2en1ol+oh=c3h3cho+pc2h4oh | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 | 1909. | nc3h7cho+c2h5=nc3h7co+c2h6 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 1852. | but3en1ol+oh=c2o+pro1oh-3 | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 | 1910. | nc3h7cho+c2h3=nc3h7co+c2h4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 1853. | sc4h9oh+h<=>sc4h9o+h2 | 5.55E-23 | 10.6 | -4459.0 | 1911. | nc3h7co=c2h5cho+h | 4.66E+10 | 0.8 | 42550.0 |
| 1854. | sc4h9oh+oh<=>sc4h9o+h2o | 2.81E+02 | 3.0 | -580.0 | 1912. | nc3h7co=ch2co+c2h5 | 2.74E+09 | 1.4 | 35830.0 |
| 1855. | sc4h9oh+o<=>sc4h9o+oh | 1.46E-03 | 4.7 | 1727.0 | 1913. | nc3h7co+m=nc3h7co+m | 8.64E+15 | 0.0 | 14400.0 |
| 1856. | sc4h9oh+ho2<=>sc4h9o+h2o2 | 2.50E+12 | 0.0 | 24000.0 | 1914. | c3h6cho-4+o2=c3h6cho-4o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1857. | sc4h9oh+ch3<=>sc4h9o+ch4 | 2.04E+00 | 3.6 | 7722.0 | 1915. | c3h6cho-4o2+ho2=but4ooh1*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 1858. | sc4h9oh+hco<=>sc4h9o+ch2o | 3.40E+04 | 2.5 | 13500.0 | 1916. | c3h6cho-4o2+h2o2=but4ooh1*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |
| 1859. | sc4h9oh+ch3o<=>sc4h9o+ch3oh | 2.30E+10 | 0.0 | 2900.0 | 1917. | c3h6cho-4o2+ho2=>c3h6cho-4o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 1860. | sc4h9oh+ch3o2<=>sc4h9o+ch3o2h | 1.50E+12 | 0.0 | 15000.0 | 1918. | c3h6cho-4o2+ch3o2>c3h6cho-4o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 1861. | sc4h9oh+c2h5<=>sc4h9o+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 9200.0 | 1919. | c3h6cho-4o=c2o+pc2h4cho | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 1862. | sc4h9oh+o=nc3h7cho-1+oh | 1.93E+05 | 2.7 | 3716.0 | 1920. | c3h6cho-4o+o2=choc2h4cho+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 220.0 |
| 1863. | sc4h9oh+o=nc3h7cho-3+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 | 1921. | c3h6cho-3o2=c3h6cho-3o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 1864. | sc4h9oh+h=nc3h7cho-1+h2 | 1.88E+05 | 2.8 | 6280.0 | 1922. | c3h6cho-3o2+ho2=but3ooh1*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 1865. | sc4h9oh+h=nc3h7cho-3+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 | 1923. | c3h6cho-3o2+h2o2=but3ooh1*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|---------------------------------------|----------|-------|---------|-------|--------------------------------|----------|-----|---------|
| 1924. | c3h6cho-3o2+ho2=>c3h6cho-3o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | 1976. | c4h92o2=c2h5coch3+oh | 1.25E+06 | 2.1 | 35600.0 |
| 1925. | c3h6cho-3o2+ch3o2=>c3h6cho-3o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | 1977. | c4h92o2=c4h82ooh1j | 1.38E+08 | 1.5 | 32400.0 |
| 1926. | c3h6cho-3o=ch3cho+ch2cho | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 | 1978. | c4h92o2=c4h82ooh3j | 7.08E+08 | 1.2 | 28800.0 |
| 1927. | c3h6cho-3o+o2=c4ald2oxo+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 220.0 | 1979. | c4h92o2=c4h82ooh4j | 1.49E+08 | 1.1 | 21500.0 |
| 1928. | c3h6cho-2+o2=c3h6cho-2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 | 1980. | c4h81ooh2j+o2=but1ooh2o2 | 1.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1929. | c3h6cho-2o2+ho2=but2ooh1*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 | 1981. | c4h81ooh3j+o2=but1ooh3o2 | 1.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1930. | c3h6cho-2o2+h2o2=but2ooh1*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 | 1982. | c4h81ooh4j+o2=but1ooh4o2 | 1.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1931. | c3h6cho-2o2+ho2=>c3h6cho-2o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | 1983. | c4h82ooh1j+o2=but2ooh1o2 | 1.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1932. | c3h6cho-2o2+ch3o2=>c3h6cho-2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | 1984. | c4h82ooh3j+o2=but2ooh3o2 | 1.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1933. | c3h6cho-2o=chocho+c2h5 | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 | 1985. | c4h82ooh4j+o2=but2ooh4o2 | 1.20E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 1934. | c3h6cho-2o+o2=c4ald3oxo+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 220.0 | 1986. | but1ooh2o2=>but1ooh2*o+oh | 1.25E+06 | 2.1 | 35600.0 |
| 1935. | c4h8-1+oh=sc4h8oh-1 | 5.00E+53 | -12.2 | 22976.0 | 1987. | but1ooh2o2=>but2ooh1*o+oh | 7.08E+08 | 1.2 | 26800.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1988. | but1ooh3o2=>but4ooh2*o+oh | 1.25E+06 | 2.1 | 35600.0 |
| 1936. | c4h8-1+oh=sc4h8oh-1 | 4.28E+41 | -9.3 | 8921.0 | 1989. | but1ooh3o2=>but3ooh1*o+oh | 8.52E+06 | 1.4 | 15900.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1990. | but1ooh4o2=>but4ooh1*o+oh | 1.84E+05 | 2.4 | 36500.0 |
| 1937. | c2c4h8+oh=sc4h8oh-3 | 5.00E+53 | -12.2 | 22976.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1991. | but1ooh4o2=>but4ooh1*o+oh | 2.86E+06 | 1.3 | 15000.0 |
| 1938. | c2c4h8+oh=sc4h8oh-3 | 4.28E+41 | -9.3 | 8921.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1992. | but2ooh1o2=>but2ooh1*o+oh | 1.84E+05 | 2.4 | 36500.0 |
| 1939. | t2c4h8+oh=sc4h8oh-3 | 5.00E+53 | -12.2 | 22976.0 | 1993. | but2ooh1o2=>but1ooh2*o+oh | 3.07E+07 | 1.4 | 23900.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1994. | but2ooh3o2=>but3ooh2*o+oh | 1.25E+06 | 2.1 | 35600.0 |
| 1940. | t2c4h8+oh=sc4h8oh-3 | 4.28E+41 | -9.3 | 8921.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 1995. | but2ooh3o2=>but3ooh2*o+oh | 3.07E+07 | 1.4 | 23900.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 1941. | sc4h8oh-1+o2=sc4h8oh-1oo | 1.50E+18 | -2.5 | 0.0 | 1996. | but2ooh4o2=>but3ooh1*o+oh | 1.84E+05 | 2.4 | 36500.0 |
| 1942. | sc4h8oh-3+o2=sc4h8oh-3oo | 9.50E+18 | -2.5 | 0.0 | 1997. | but2ooh4o2=>but4ooh2*o+oh | 2.69E+07 | 1.1 | 14100.0 |
| 1943. | pc4h8oh-2oo=c2h5cho+c2h2o+oh | 1.00E+09 | 0.0 | 30.0 | 1998. | but2ooh1*o=>c2h5cho+hco+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 1944. | sc4h8oh-1oo=c2h5cho+ch2o+oh | 1.00E+09 | 0.0 | 30.0 | 1999. | but3ooh1*o=>ch3cho+ch2cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 1945. | sc4h8oh-3oo=ch3cho+ch3cho+oh | 1.00E+09 | 0.0 | 30.0 | 2000. | but4ooh1*o=>c2h2o+pc2h4cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 1946. | sc4h8oh-1=ch3cho+c2h5 | 1.52E+12 | 0.6 | 31120.0 | 2001. | but1ooh2*o=>c2h5cho+ch2o+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 1947. | sc4h8oh-1+o2=c2h5coch3+ho2 | 2.25E+11 | 0.0 | 2500.0 | 2002. | but3ooh2*o=>ch3co+ch3cho+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 1948. | sc4h8oh-3=ch3+c2h5cho | 1.52E+12 | 0.6 | 31120.0 | 2003. | but4ooh2*o=>c2h2o+ch3coch2+oh | 1.00E+16 | 0.0 | 43000.0 |
| 1949. | sc4h8oh-3+o2=c2h5coch3+ho2 | 2.25E+11 | 0.0 | 2500.0 | 2004. | but4ooh2*o=>ch3cooh+ch3cho | 2.10E+08 | 0.0 | 24500.0 |
| 1950. | nc4h10+c4h91o2=pc4h9+c4h91o2h | 1.68E+13 | 0.0 | 20440.0 | 2005. | but3ooh1*o=>ch3coch3+hcooh | 2.10E+08 | 0.0 | 23000.0 |
| 1951. | nc4h10+c4h91o2=sc4h9+c4h91o2h | 1.12E+13 | 0.0 | 17690.0 | 2006. | but3ooh1*o=>ch3cooh+ch3cho | 2.10E+08 | 0.0 | 24500.0 |
| 1952. | nc4h10+c4h92o2=pc4h9+c4h92o2h | 1.68E+13 | 0.0 | 20440.0 | 2007. | c4h81ooh2j=c4h8cy1o2+oh | 3.30E+10 | 0.5 | 14600.0 |
| 1953. | nc4h10+c4h92o2=sc4h9+c4h92o2h | 1.12E+13 | 0.0 | 17690.0 | 2008. | c4h81ooh3j=c4h8cy1o3+oh | 1.20E+10 | 0.3 | 17700.0 |
| 1954. | pc4h9+o2=c4h91o2 | 2.54E+55 | -13.3 | 16300.0 | 2009. | c4h81ooh4j=c4h8cy1o4+oh | 2.26E+09 | 0.3 | 11000.0 |
| 1955. | sc4h9+o2=c4h92o2 | 2.01E+31 | -6.0 | 5209.0 | 2010. | c4h82ooh1j=c4h8cy1o2+oh | 1.24E+11 | 0.5 | 14500.0 |
| 1956. | c2h5o2+ch3o2=>c2h5oh+ch2o+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2011. | c4h82ooh3j=c4h8cy2o3+oh | 3.30E+10 | 0.5 | 14600.0 |
| 1957. | c2h5o2+ch3o2=>ch3cho+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2012. | c4h82ooh4j=c4h8cy1o3+oh | 3.05E+10 | 0.3 | 20200.0 |
| 1958. | c4h91o2+ch3o2=>pc4h9oh+ch2o+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2013. | c4h8cy1o2+h=>h2+c3h6cho-2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1959. | c4h91o2+ch3o2=>nc3h7cho+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2014. | c4h8cy1o2+h=>h2+c2h5+ch2co | 9.60E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1960. | c4h92o2+ch3o2=>sc4h9oh+ch2o+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2015. | c4h8cy1o2+h=>h2+c2h5coch2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1961. | c4h92o2+ch3o2=>c2h5coch3+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2016. | c4h8cy1o3+h=>h2+c3h6cho-3 | 9.60E+08 | 1.5 | 2785.0 |
| 1962. | c4h91o2+c4h91o2=>pc4h9oh+nc3h7cho+o2 | 5.00E+10 | 0.0 | 0.0 | 2017. | c4h8cy1o3+h=>h2+acetoch2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1963. | c4h91o2+c4h92o2=>pc4h9oh+c2h5coch3+o2 | 5.00E+10 | 0.0 | 0.0 | 2018. | c4h8cy1o4+h=>h2+c3h6cho-4 | 1.92E+09 | 1.5 | 2005.0 |
| 1964. | c4h91o2+c4h92o2=>nc3h7cho+sc4h9oh+o2 | 5.00E+10 | 0.0 | 0.0 | 2019. | c4h8cy2o3+h=>h2+c3hcoch3 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 |
| 1965. | c4h92o2+c4h92o2=>sc4h9oh+c2h5coch3+o2 | 5.00E+10 | 0.0 | 0.0 | 2020. | c4h8cy1o2+oh=>h2o+c3h6cho-2 | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1966. | but1ooh2o2+ch3o2=>but2ooh1*o+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2021. | c4h8cy1o2+oh=>h2o+c2h5+ch2co | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1967. | but1ooh3o2+ch3o2=>but3ooh1*o+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2022. | c4h8cy1o2+oh=>h2o+c2h5coch2 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1968. | but1ooh4o2+ch3o2=>but4ooh1*o+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2023. | c4h8cy1o3+oh=>h2o+c3h6cho-3 | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1969. | but2ooh1o2+ch3o2=>but1ooh2*o+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2024. | c4h8cy1o3+oh=>h2o+acetoch2 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1970. | but2ooh3o2+ch3o2=>but3ooh2*o+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2025. | c4h8cy1o4+oh=>h2o+c3h6cho-4 | 9.60E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1971. | but2ooh4o2+ch3o2=>but4ooh2*o+ch3oh+o2 | 1.34E+11 | 0.0 | 0.0 | 2026. | c4h8cy2o3+oh=>h2o+ch3chcoch3 | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 |
| 1972. | c4h91o2=nc3h7cho+oh | 1.84E+05 | 2.4 | 36500.0 | 2027. | c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c3h6cho-2 | 8.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 1973. | c4h91o2=c4h81ooh2j | 1.92E+07 | 1.5 | 28600.0 | 2028. | c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c2h5+ch2co | 8.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 1974. | c4h91o2=c4h81ooh3j | 9.34E+07 | 1.1 | 18600.0 | 2029. | c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c2h5coch2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 1975. | c4h91o2=c4h81ooh4j | 1.46E+06 | 1.4 | 20500.0 | | | | | |

| | | | | |
|-------|-----------------------------------|----------|------|---------|
| 2030. | c4h8cy1o3+ho2=>h2o2+c3h6cho-3 | 8.00E+12 | 0.0 | 14400.0 |
| 2031. | c4h8cy1o3+ho2=>h2o2+acetoch2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 2032. | c4h8cy1o4+ho2=>h2o2+c3h6cho-4 | 1.60E+13 | 0.0 | 14400.0 |
| 2033. | c4h8cy2o3+ho2=>h2o2+ch3chcoch3 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 |
| 2034. | c4h8cy1o2=nc3h7cho | 1.59E+12 | -0.8 | 46420.0 |
| 2035. | c4h8cy1o2=c2h5coch3 | 1.59E+12 | -0.8 | 46420.0 |
| 2036. | c4h8cy2o3=c2h5coch3 | 3.18E+12 | -0.8 | 46420.0 |
| 2037. | c4h91o2=c4h8-1+ho2 | 1.26E+08 | 1.4 | 28900.0 |
| 2038. | c4h92o2=c4h8-1+ho2 | 5.13E+09 | 1.0 | 30400.0 |
| 2039. | c4h92o2=c2c4h8+ho2 | 3.40E+10 | 0.7 | 30700.0 |
| 2040. | c4h92o2=t2c4h8+ho2 | 1.45E+10 | 0.8 | 29900.0 |
| 2041. | but3ooh2*o=>ch3cococh3+h2o | 1.28E+07 | 2.2 | 44950.0 |
| 2042. | but2ooh1*o=>c4ald2oxo+h+oh | 2.50E+14 | 0.0 | 43000.0 |
| 2043. | but3ooh1*o=>c4ald3oxo+h+oh | 2.50E+14 | 0.0 | 43000.0 |
| 2044. | but4ooh1*o=>choc2h4cho+h+oh | 2.50E+14 | 0.0 | 43000.0 |
| 2045. | but1ooh2*o=>c4ald2oxo+h+oh | 2.50E+14 | 0.0 | 43000.0 |
| 2046. | but3ooh2*o=>ch3cococh3+h+oh | 2.50E+14 | 0.0 | 43000.0 |
| 2047. | but4ooh2*o=>c4ald3oxo+h+oh | 2.50E+14 | 0.0 | 43000.0 |
| 2048. | but2ooh1*o+oh=>c4ald2oxo+oh+h2o | 3.62E+12 | 0.0 | -380.0 |
| 2049. | but3ooh1*o+oh=>c4ald3oxo+oh+h2o | 3.62E+12 | 0.0 | -380.0 |
| 2050. | but4ooh1*o+oh=>choc2h4cho+oh+h2o | 3.62E+12 | 0.0 | -380.0 |
| 2051. | but1ooh2*o+oh=>c4ald2oxo+oh+h2o | 3.62E+12 | 0.0 | -380.0 |
| 2052. | but3ooh2*o+oh=>ch3cococh3+oh+h2o | 3.62E+12 | 0.0 | -380.0 |
| 2053. | but4ooh2*o+oh=>c4ald3oxo+oh+h2o | 3.62E+12 | 0.0 | -380.0 |
| 2054. | c4h91o2+h2o2=c4h91o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2055. | c4h91o2+h2o2=c4h91o2h+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |
| 2056. | c4h91o2+ch2o=c4h91o2h+hco | 1.99E+12 | 0.0 | 11660.0 |
| 2057. | c4h91o2+ch3cho=c4h91o2h+ch3co | 1.00E+12 | 0.0 | 11660.0 |
| 2058. | c4h91o2+ho2=>pc4h9o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2059. | c4h91o2+ch3o2=>pc4h9o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2060. | c4h91o2+c4h91o2=>pc4h9o+pc4h9o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 2061. | c4h91o2h=pc4h9o+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 |
| 2062. | c4h92o2+ho2=c4h92o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 2063. | c4h92o2+h2o2=c4h92o2h+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |
| 2064. | c4h92o2+ch2o=c4h92o2h+hco | 1.99E+12 | 0.0 | 11660.0 |
| 2065. | c4h92o2+ch3cho=c4h92o2h+ch3co | 1.00E+12 | 0.0 | 11660.0 |
| 2066. | c4h92o2+ho2=>sc4h9o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2067. | c4h92o2+ch3o2=>sc4h9o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 2068. | c4h92o2+c4h91o2=>sc4h9o+pc4h9o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 2069. | c4h92o2+c4h92o2=>sc4h9o+sc4h9o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 2070. | c4h92o2h=sc4h9o+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 |
| 2071. | sc4h9o=c2h5coch3+h | 1.51E+13 | 0.0 | 18070.0 |
| 2072. | sc4h9o=ch3cho+c2h5 | 5.25E+13 | 0.0 | 11690.0 |
| 2073. | sc4h9o=ch3+c2h5cho | 1.78E+13 | 0.0 | 14890.0 |
| 2074. | sc4h9o+o2=c2h5coch3+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 420.0 |
| 2075. | c4h81ooh3j=>c3h6+ch2o+oh | 1.23E+09 | 1.3 | 24900.0 |
| 2076. | c4h81ooh4j=>c2h4+c2h4o2h | 2.33E+12 | 0.6 | 29000.0 |
| 2077. | c4h82ooh4j=>c2h4+ch3cho+oh | 3.08E+08 | 1.5 | 23500.0 |
| 2078. | c4h82ooh4j=>c3h6+ch2o+oh | 3.08E+08 | 1.5 | 23500.0 |
| 2079. | c4h82ooh1j=>ch2cho+c2h5+oh | 4.87E+12 | 0.3 | 29600.0 |
| 2080. | c4h81ooh2j=>c3h5+ch3+oh | 1.09E+09 | 1.4 | 29500.0 |
| 2081. | c4h82ooh3j=>ch3chcho+ch3+oh | 2.78E+11 | 0.7 | 32500.0 |
| 2082. | c4h91o2+pc4h9=pc4h9o+pc4h9o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2083. | c4h91o2+sc4h9=pc4h9o+sc4h9o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2084. | c4h92o2+pc4h9=sc4h9o+pc4h9o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2085. | c4h92o2+sc4h9=sc4h9o+sc4h9o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2086. | pc4h9+ho2=pc4h9o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2087. | sc4h9+ho2=sc4h9o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |

| | | | | |
|-------|---------------------------------|----------|------|---------|
| 2088. | c4h91o2+ch3=pc4h9o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2089. | c4h92o2+ch3=sc4h9o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2090. | pc4h9+ch3o2=pc4h9o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2091. | sc4h9+ch3o2=sc4h9o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 2092. | c4h713+o2=c4h73o2 | 6.00E+09 | 0.0 | -2300.0 |
| 2093. | c4h713+o2=c4h71o2 | 6.00E+09 | 0.0 | -2300.0 |
| 2094. | c4h73o2=c4h6+ho2 | 5.13E+09 | 1.0 | 28400.0 |
| 2095. | c4h73o2=c4h63ooh4j | 8.62E+08 | 1.0 | 35500.0 |
| 2096. | c4h71o2=c4h61ooh4j | 1.48E+08 | 1.0 | 21000.0 |
| 2097. | c4h63ooh4j+o2=c4h63ooh4o2 | 1.50E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 2098. | c4h61ooh4j+o2=c4h61ooh4o2 | 1.20E+10 | 0.0 | -2300.0 |
| 2099. | c4h63ooh4o2=>c4h54o2h3*o+oh | 2.87E+08 | 1.0 | 25500.0 |
| 2100. | c4h61ooh4o2=>c4h54o2h1*o+oh | 9.87E+07 | 1.0 | 26500.0 |
| 2101. | c4h54o2h3*o=>ch2o+c2h3co+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 |
| 2102. | c4h54o2h1*o=>ch2o+c2h2+hco+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 |
| 2103. | c4h73o2=ch3cho+ch2cho | 1.70E+09 | 1.0 | 26400.0 |
| 2104. | c4h71o2=ch3chcho+ch2o | 1.70E+09 | 1.0 | 26400.0 |
| 2105. | ch3coch3+ch3o=ch3coch2+ch3oh | 1.00E+11 | 0.0 | 7000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+10 | 0.0 | 9000.0 |
| 2106. | tc3h6cho=ic3h5cho+h | 2.88E+16 | -0.6 | 41280.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+13 | 0.0 | 1200.0 |
| 2107. | tc3h6cho=ic3h6co+h | 8.88E+16 | -0.7 | 44350.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.30E+13 | 0.0 | 4800.0 |
| 2108. | tc3h6cho+h2=ic3h7cho+h | 2.16E+05 | 2.4 | 18990.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.32E+05 | 2.5 | 3550.0 |
| 2109. | ic3h7cho=tc3h6cho+h | 2.30E+18 | -0.9 | 92000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| 2110. | tc3h6cho+ch2o=ic3h7cho+hco | 2.52E+08 | 1.9 | 18190.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+07 | 2.0 | 17420.0 |
| 2111. | ic3h6co+oh=ic3h7+co2 | 1.73E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.58E+14 | -0.4 | 55480.0 |
| 2112. | ic3h7cho+ho2=ic3h7co+h2o2 | 3.00E+12 | 0.0 | 11920.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.71E+12 | -0.3 | 11990.0 |
| 2113. | ic3h7cho+ho2=tc3h6cho+h2o2 | 8.00E+10 | 0.0 | 11920.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.37E+12 | -0.4 | 11050.0 |
| 2114. | ic3h7cho+ch3=ic3h7co+ch4 | 3.98E+12 | 0.0 | 8700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.32E+13 | -0.1 | 25630.0 |
| 2115. | ic3h7cho+o=ic3h7co+oh | 7.18E+12 | 0.0 | 1389.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.05E+11 | -0.1 | 15740.0 |
| 2116. | ic3h7cho+o2=ic3h7co+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 37600.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.62E+11 | 0.3 | -3432.0 |
| 2117. | ic3h7cho+oh=ic3h7co+h2o | 2.41E+12 | 0.0 | -781.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.33E+12 | -0.1 | 30820.0 |
| 2118. | ic3h7cho+oh=tc3h6cho+h2o | 1.68E+12 | 0.0 | -781.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.19E+13 | -0.1 | 29810.0 |
| 2119. | ic3h7cho+h=ic3h7co+h2 | 2.60E+12 | 0.0 | 2600.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.00E+00 | 0.0 | 0.0 |
| 2120. | ic3h7cho=ic3h7+hco | 1.13E+17 | -0.0 | 79760.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2121. | ic3h7co=ic3h7+co | 1.43E+13 | -0.0 | 10950.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.50E+11 | 0.0 | 4810.0 |
| 2122. | ic3h7cho+oh=ic3h6cho+h2o | 3.12E+06 | 2.0 | -298.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.39E+05 | 2.0 | 19130.0 |
| 2123. | ic3h7cho+ho2=ic3h6cho+h2o2 | 2.74E+04 | 2.5 | 15500.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.33E+04 | 2.2 | 3468.0 |
| 2124. | tc3h6cho+o2=ic3h5cho+ho2 | 2.72E-19 | 0.0 | 7240.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.39E+11 | -0.2 | 17310.0 |
| 2125. | tc3h6cho+o2=ch3coch3+co+oh | 3.62E-20 | 0.0 | 0.0 |

Warning...all REV parameters are zero... 0.000E+00 0.00 0.000E+00
 this reaction will be treated as irreversible

| | | | | |
|-------|--------------------------------------|-------------|--------------|-------------------------|
| 2126. | tc3h6cho+ho2=ic3h7cho+o2 | 3.68E+12 | 0.0 | 1310.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.24E+14 | -0.2 | 43350.0 |
| 2127. | tc3h6cho+ch3=ic3h5cho+ch4 | 3.01E+12 | -0.3 | -131.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.21E+15 | -0.8 | 67900.0 |
| 2128. | ic3h5cho+oh=ic3h5co+h2o | 6.13E+04 | 2.6 | -4586.4 |
| 2129. | ic3h5cho+ho2=ic3h5co+h2o2 | 1.18E-04 | 4.9 | 3684.3 |
| 2130. | ic3h5cho+ch3=ic3h5co+ch4 | 3.98E+12 | 0.0 | 8700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.52E+13 | 0.0 | 25570.0 |
| 2131. | ic3h5cho+o=ic3h5co+oh | 7.18E+12 | 0.0 | 1389.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 4.61E+11 | 0.0 | 15680.0 |
| 2132. | ic3h5cho+c2=ic3h5co+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 40700.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 5.31E+10 | 0.3 | -394.0 |
| 2133. | ic3h5cho+h=ic3h5co+h2 | 2.60E+12 | 0.0 | 2600.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.80E+11 | 0.0 | 18990.0 |
| 2134. | ic3h5co=c3h5-t+co | 4.78E+12 | 0.0 | 27470.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.51E+11 | 0.0 | 4809.0 |
| 2135. | ic3h7+oh=c3h6+h2o | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.98E+12 | 0.6 | 83820.0 |
| 2136. | c2h5coch3+h=c2h5+ch3cho | 3.55E+12 | -0.1 | 7920.7 |
| 2137. | c2h5coch3+h=c2h5co+ch3 | 9.98E+10 | 0.3 | 9474.7 |
| 2138. | c2h5coch3 (+m) <=> c2h5+ch3co (+m) | 3.56E+27 | -3.2 | 85748.1 |
| | Low pressure limit: | 0.25780E+80 | -0.17020E+02 | 0.96875E+05 |
| | TROE centering: | 0.20000E-03 | 0.91070E+03 | 0.22707E+05 0.56355E+04 |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| 2139. | c2h5coch3 (+m) <=> c2h5co+ch3 (+m) | 3.36E+27 | -3.4 | 88546.3 |
| | Low pressure limit: | 0.11750E+73 | -0.15361E+02 | 0.90947E+05 |
| | TROE centering: | 0.76000E-01 | 0.70200E+03 | 0.74415E+05 0.50698E+04 |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| 2140. | c2h5coch3 (+m) <=> ch3coch2+ch3 (+m) | 2.24E+24 | -2.5 | 87646.2 |
| | Low pressure limit: | 0.44170E+70 | -0.14656E+02 | 0.94756E+05 |
| | TROE centering: | 0.12440E+00 | 0.10579E+04 | 0.10430E+07 0.61129E+04 |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| 2141. | c2h5coch3 (+m) <=> h+c2h5coch2 (+m) | 3.05E+16 | -0.3 | 97579.1 |
| | Low pressure limit: | 0.46750E+32 | -0.45850E+01 | 0.83405E+05 |
| | TROE centering: | 0.66330E+00 | 0.15028E+06 | 0.32000E+01 0.10054E+04 |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |

| | | | | |
|-------|--------------------------------------|-------------|--------------|-------------------------|
| 2142. | c2h5coch3 (+m) <=> h+ch3chcoch3 (+m) | 1.23E+14 | 0.4 | 91068.9 |
| | Low pressure limit: | 0.74800E+33 | -0.51040E+01 | 0.70813E+05 |
| | TROE centering: | 0.50000E+00 | 0.12000E+01 | 0.12000E+01 0.14285E+04 |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| 2143. | c2h5coch3 (+m) <=> h+acetoch2 (+m) | 3.23E+13 | 0.7 | 99725.1 |
| | Low pressure limit: | 0.40220E+27 | -0.30930E+01 | 0.85410E+05 |
| | TROE centering: | 0.20400E-01 | 0.22467E+04 | 0.17054E+04 0.10730E+04 |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | |
| 2144. | c2h5coch3+oh<=>acetoch2+h2o | 1.35E+00 | 3.8 | -2900.0 |
| 2145. | c2h5coch3+oh<=>ch3chcoch3+h2o | 2.36E+02 | 3.1 | -3050.0 |
| 2146. | c2h5coch3+oh<=>c2h5coch2+h2o | 3.99E+02 | 3.1 | -944.0 |
| 2147. | c2h5coch3+ho2<=>acetoch2+h2o2 | 6.18E-05 | 4.9 | 14100.0 |
| 2148. | c2h5coch3+ho2<=>ch3chcoch3+h2o2 | 8.42E-02 | 3.9 | 13400.0 |
| 2149. | c2h5coch3+ho2<=>c2h5coch2+h2o2 | 5.58E-03 | 4.3 | 16400.0 |
| 2150. | c2h5coch3+h<=>acetoch2+h2 | 7.35E+06 | 2.3 | 8780.9 |
| 2151. | c2h5coch3+h<=>ch3chcoch3+h2 | 1.99E+06 | 2.3 | 4083.8 |
| 2152. | c2h5coch3+h<=>c2h5coch2+h2 | 1.20E+07 | 2.2 | 6937.8 |
| 2153. | c2h5coch3+ch3<=>acetoch2+ch4 | 3.60E+00 | 3.5 | 11228.3 |
| 2154. | c2h5coch3+ch3<=>ch3chcoch3+ch4 | 2.00E+00 | 3.4 | 6858.1 |
| 2155. | c2h5coch3+ch3<=>c2h5coch2+ch4 | 2.04E+01 | 3.4 | 9356.1 |
| 2156. | c2h5coch3+o<=>acetoch2+oh | 9.81E+05 | 2.4 | 4750.0 |
| 2157. | c2h5coch3+o<=>ch3chcoch3+oh | 1.44E+11 | 0.2 | 2970.0 |
| 2158. | c2h5coch3+o<=>c2h5coch2+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 5962.0 |
| 2159. | c2h5coch3+o2<=>acetoch2+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 52290.0 |
| 2160. | c2h5coch3+o2<=>ch3chcoch3+ho2 | 2.02E+13 | 0.0 | 45850.0 |
| 2161. | c2h5coch3+o2<=>c2h5coch2+ho2 | 2.05E+13 | 0.0 | 49150.0 |
| 2162. | c2h5coch3+ch3o<=>acetoch2+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 6460.0 |
| 2163. | c2h5coch3+ch3o<=>ch3chcoch3+ch3oh | 5.76E+11 | 0.0 | 4573.0 |
| 2164. | c2h5coch3+ch3o<=>c2h5coch2+ch3oh | 2.17E+11 | 0.0 | 4660.0 |
| 2165. | c2h5coch3+ch3o2<=>acetoch2+ch3o2h | 6.90E-01 | 4.0 | 18280.0 |
| 2166. | c2h5coch3+ch3o2<=>ch3chcoch3+ch3o2h | 3.44E+12 | 0.1 | 17880.0 |
| 2167. | c2h5coch3+ch3o2<=>c2h5coch2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| 2168. | c2h5coch3+c2h3<=>acetoch2+c2h4 | 5.00E+11 | 0.0 | 10400.0 |
| 2169. | c2h5coch3+c2h3<=>ch3chcoch3+c2h4 | 3.00E+11 | 0.0 | 5600.0 |
| 2170. | c2h5coch3+c2h3<=>c2h5coch2+c2h4 | 6.15E+10 | 0.0 | 4278.0 |
| 2171. | c2h5coch3+c2h5<=>acetoch2+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 13400.0 |
| 2172. | c2h5coch3+c2h5<=>ch3chcoch3+c2h6 | 3.00E+11 | 0.0 | 8600.0 |
| 2173. | c2h5coch3+c2h5<=>c2h5coch2+c2h6 | 5.00E+10 | 0.0 | 11600.0 |
| 2174. | acetoch2+o2<=>ho2+c2h3coch3 | 2.63E+00 | 3.5 | 1481.2 |
| 2175. | ch3chcoch3+o2<=>c2h3coch3+ho2 | 3.86E-07 | 4.2 | 4221.5 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 2176. | ch3chcoch3+o2<=>c2h3coch3+ho2 | 1.50E-02 | 4.0 | 13140.8 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 2177. | ch3chcoch3+o2<=>c2h3coch3+ho2 | 1.67E+15 | -1.4 | 8322.4 |
| | Declared duplicate reaction... | | | |
| 2178. | acetoch2<=>c2h4+ch3co | 3.83E+32 | -6.0 | 32835.5 |
| 2179. | acetoch2<=>h+c2h3coch3 | 1.40E+35 | -7.3 | 44868.4 |
| 2180. | acetoch2<=>ch3chcoch3 | 1.01E+40 | -8.8 | 42042.9 |

| | | | | | | | | | |
|-------|---|-------------|--------------|-------------|-------------|--|--|--|--|
| 2181. | aceto2<=>c2h5coch2 | 3.35E+33 | -7.1 | 34478. | | | | | |
| 2182. | aceto2<=>ch3+ch3chco | 6.44E+11 | -0.1 | 43433. | | | | | |
| 2183. | aceto2<=>c2h5+ch2co | 1.21E+29 | -5.4 | 46577. | | | | | |
| 2184. | h+aceto2<=>c2h5+ch3co | 1.47E+35 | -5.8 | 20746. | | | | | |
| 2185. | h+aceto2<=>c2h5co+ch3 | 9.35E+33 | -5.5 | 20860. | | | | | |
| 2186. | h+aceto2<=>ch3coch2+ch3 | 8.13E+32 | -5.2 | 20915. | | | | | |
| 2187. | ch3chcoch3+ho2<=>ch3chococh3+oh | 4.41E+28 | -4.6 | 11770. | | | | | |
| 2188. | ch3chcoch3+ho2<=>ch3cococh3+h2o | 1.53E+19 | -2.2 | 9357 | | | | | |
| 2189. | ch3chcoch3<=>ch3+ch3chco | 1.52E+31 | -5.2 | 53980. | | | | | |
| 2190. | ch3chcoch3<=>h+c2h3coch3 | 1.67E+29 | -4.8 | 53356. | | | | | |
| 2191. | ch3chcoch3<=>c2h5coch2 | 1.22E+48 | -10.9 | 67143. | | | | | |
| 2192. | ch3chcoch3<=>c2h4+ch3co | 8.42E+39 | -7.9 | 59709. | | | | | |
| 2193. | ch3chcoch3<=>c2h5+ch2co | 7.13E+50 | -11.1 | 79262. | | | | | |
| 2194. | h+ch3chcoch3<=>c2h5+ch3co | 3.32E+36 | -6.1 | 24776. | | | | | |
| 2195. | h+ch3chcoch3<=>ch3coch2+ch3 | 3.08E+38 | -6.7 | 28683. | | | | | |
| 2196. | h+ch3chcoch3<=>c2h5co+ch3 | 4.41E+39 | -7.0 | 28667. | | | | | |
| 2197. | c2h5coch2<=>c2h5+ch2co | 1.70E+29 | -4.8 | 42920. | | | | | |
| 2198. | c2h5coch2<=>ch3+ch3chco | 6.92E+48 | -10.6 | 74370. | | | | | |
| 2199. | c2h5coch2<=>c2h4+ch3co | 6.32E+42 | -9.0 | 52442. | | | | | |
| 2200. | c2h5coch2<=>h+c2h3coch3 | 1.35E+35 | -7.1 | 57179. | | | | | |
| 2201. | h+c2h5coch2<=>c2h5+ch3co | 2.24E+39 | -6.9 | 25024. | | | | | |
| 2202. | h+c2h5coch2<=>c2h5co+ch3 | 3.24E+44 | -8.3 | 30920. | | | | | |
| 2203. | h+c2h5coch2<=>ch3coch2+ch3 | 1.76E+35 | -5.7 | 23742. | | | | | |
| 2204. | c2h5coch2+ho2<=>c2h5coch2o+oh | 1.66E+29 | -4.6 | 12875. | | | | | |
| 2205. | aceto2+o2=aceto2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0 | | | | | |
| 2206. | aceto2o2+ho2=but4ooh2*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790. | | | | | |
| 2207. | aceto2o2+h2o2=but4ooh2*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936 | | | | | |
| 2208. | aceto2o2+ho2=>aceto2o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860 | | | | | |
| 2209. | aceto2o2+ch3o2=>aceto2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860 | | | | | |
| 2210. | aceto2o=ch2o+ch3coch2 | 2.00E+13 | 0.0 | 20000. | | | | | |
| 2211. | aceto2o+o2=c4a1d3oxo+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 220 | | | | | |
| 2212. | c2h5coch2+o2=c2h5coch2o | 9.00E+18 | -2.5 | 0 | | | | | |
| 2213. | c2h5coch2o2+ho2=but1ooh2*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790. | | | | | |
| 2214. | c2h5coch2o2+h2o2=but1ooh2*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936 | | | | | |
| 2215. | c2h5coch2o2+ho2=>c2h5coch2o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860 | | | | | |
| 2216. | c2h5coch2o2+ch3o2=>c2h5coch2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860 | | | | | |
| 2217. | c2h5coch2o<=>c2h5co+ch2o | 1.14E+13 | 0.1 | 1125 | | | | | |
| 2218. | c2h5coch2o+o2=c4a1d2oxo+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 220 | | | | | |
| 2219. | ch3chcoch3+o2=c43oo2*o | 1.00E+19 | -2.5 | 0 | | | | | |
| 2220. | c43oo2*o+ho2=but3ooh2*o+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790. | | | | | |
| 2221. | c43oo2*o+h2o2=but3ooh2*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936 | | | | | |
| 2222. | c43oo2*o+ho2=>ch3chococh3+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860 | | | | | |
| 2223. | c43oo2*o+ch3o2=>ch3chococh3+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860 | | | | | |
| 2224. | ch3chococh3=ch3cho+ch3co | 2.00E+13 | 0.0 | 20000. | | | | | |
| 2225. | c2h3coch3(+m)<=>ch3co+c2h3(+m) | 2.58E+22 | -1.7 | 92775. | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.43080E+64 | -0.12945E+02 | 0.10164E+06 | | | | | |
| | TROE centering: | 0.24820E+00 | 0.57015E+04 | 0.36000E+02 | 0.10539E+05 | | | | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | | | | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | | | | | | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | | | | |
| 2226. | c2h3coch3(+m)<=>c2h3co+ch3(+m) | 9.77E+20 | -1.2 | 84070. | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.23380E+74 | -0.15321E+02 | 0.93700E+05 | | | | | |
| | TROE centering: | 0.31730E+00 | 0.92670E+03 | 0.39500E+02 | 0.66310E+04 | | | | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | | | | |
| 2227. | c2h3coch3(+m)<=>c2h3coch2+h(+m) | 3.52E+18 | -0.9 | 99383.8 | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.31600E+40 | -0.66860E+01 | 0.93378E+05 | | | | | |
| | TROE centering: | 0.34720E+00 | 0.70000E+00 | 0.20800E+02 | 0.13920E+03 | | | | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | | | | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | | | | | | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | | | | |
| 2228. | c2h3coch3+oh=ch3cho+ch3co | 6.68E+17 | -1.4 | 6375.0 | | | | | |
| 2229. | c2h3coch3+o=c2h3coch2+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 5962.0 | | | | | |
| 2230. | c2h3coch3+h=c2h3coch2+h2 | 1.20E+07 | 2.2 | 6937.8 | | | | | |
| 2231. | c2h3coch3+oh=c2h3coch2+h2o | 3.99E+02 | 3.1 | -944.0 | | | | | |
| 2232. | c2h3coch3+ho2=c2h3coch2+h2o2 | 1.98E-03 | 4.5 | 8372.0 | | | | | |
| 2233. | c2h3coch3+ch3<=>c2h3coch2+ch4 | 2.04E+01 | 3.4 | 9356.1 | | | | | |
| 2234. | c2h3coch3+h=c2h4+ch3co | 1.26E+21 | -2.0 | 12593.5 | | | | | |
| 2235. | h+c2h3coch3<=>ch3+ch3chco | 4.94E+22 | -2.0 | 23813.6 | | | | | |
| 2236. | c2h3coch3+ch3=c2h3co+c2h6 | 5.70E+00 | 4.0 | 41700.0 | | | | | |
| 2237. | c2h3coch3+ch3=c2h3co+c3h6 | 4.69E+20 | -2.5 | 19711.0 | | | | | |
| 2238. | c2h3coch2(+m)<=>ch2co+c2h3(+m) | 4.87E+14 | -0.1 | 48621.5 | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.59560E+33 | -0.46130E+01 | 0.37873E+05 | | | | | |
| | TROE centering: | 0.50500E-01 | 0.80870E+03 | 0.40299E+04 | 0.61983E+04 | | | | |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | | | | |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | | | | | | |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | | | | |
| | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | | | | |
| 2239. | h+c2h3coch2<=>c2h3co+ch3 | 2.69E+28 | -3.8 | 15586.8 | | | | | |
| 2240. | h+c2h3coch2<=>c2h3+ch3co | 3.14E+26 | -3.4 | 18155.7 | | | | | |
| 2241. | ic3h6co+h=ic3h7+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 | | | | | |
| | Warning...all REV parameters are zero... | 0.000E+00 | 0.00 | 0.000E+00 | | | | | |
| | this reaction will be treated as irreversible | | | | | | | | |
| 2242. | ic3h6co+o=c3h3coch3+co | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 | | | | | |
| | Warning...all REV parameters are zero... | 0.000E+00 | 0.00 | 0.000E+00 | | | | | |
| | this reaction will be treated as irreversible | | | | | | | | |
| 2243. | ch3chco+oh=c2h5+co2 | 1.73E+12 | 0.0 | -1010.0 | | | | | |
| | Warning...all REV parameters are zero... | 0.000E+00 | 0.00 | 0.000E+00 | | | | | |
| | this reaction will be treated as irreversible | | | | | | | | |
| 2244. | c2h5chco+h=sc3h5co+h2 | 3.02E+06 | 2.2 | 655.0 | | | | | |
| 2245. | c2h5chco+oh=sc3h5co+h2o | 2.02E+06 | 2.2 | -437.0 | | | | | |
| 2246. | c2h5chco+ho2=sc3h5co+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 | | | | | |
| 2247. | c2h5chco+ch3=sc3h5co+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 | | | | | |
| 2248. | c2h5chco+oh=nc3h7+co2 | 3.73E+12 | 0.0 | -1010.0 | | | | | |
| | Warning...all REV parameters are zero... | 0.000E+00 | 0.00 | 0.000E+00 | | | | | |
| | this reaction will be treated as irreversible | | | | | | | | |
| 2249. | c2h5chco+h=nc3h7+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 | | | | | |
| | Warning...all REV parameters are zero... | 0.000E+00 | 0.00 | 0.000E+00 | | | | | |
| | this reaction will be treated as irreversible | | | | | | | | |
| 2250. | c2h5chco+o=c3h6+co2 | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 | | | | | |
| | Warning...all REV parameters are zero... | 0.000E+00 | 0.00 | 0.000E+00 | | | | | |
| | this reaction will be treated as irreversible | | | | | | | | |
| 2251. | ch3chocho=ch3cho+hco | 3.98E+13 | 0.0 | 9700.0 | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 4.34E+05 | 1.7 | 8282.0 | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|-------|-----------------------------------|-------------|--------------|-------------|-----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------|
| 2324. | ic4h9=c3h6+ch3 | 9.59E+11 | 0.8 | 30710.0 | | | | | | |
| 2325. | ic4h9+ho2=>ic3h7+ch2o+oh | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| 2326. | tc4h9=c3h6+ch3 | 3.00E+14 | 0.0 | 46300.0 | | | | | | |
| 2327. | tc4h9+ho2=>ch3coch3+ch3+oh | 1.80E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| 2328. | tc4h9+oh=ic4h8+h2o | 1.80E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| 2329. | tc4h9+h=ic4h8+h2 | 5.40E+12 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| 2330. | tc4h9+o=ic4h8+oh | 4.16E+14 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| 2331. | tc4h9+o=ch3coch3+ch3 | 1.04E+14 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| 2332. | tc4h9+ch3=ic4h8+ch4 | 1.26E+13 | 0.0 | -596.0 | | | | | | |
| 2333. | ic4h9o2+c3h6=ic4h9o2h+c3h5-a | 3.24E+11 | 0.0 | 14900.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.00E+10 | 0.0 | 15000.0 | | | | | | |
| 2334. | ic4h9o2+ic4h8=ic4h9o2h+ic4h7 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 | | | | | | |
| 2335. | ic4h9o2+c4h8-1=ic4h9o2h+c4h713 | 1.40E+12 | 0.0 | 14900.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.16E+11 | 0.0 | 13000.0 | | | | | | |
| 2336. | ic4h9o=ch2o+ic3h7 | 2.00E+14 | 0.0 | 17500.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.16E+11 | 0.1 | 11510.0 | | | | | | |
| 2337. | ic4h9o+o2=ic3h7cho+ho2 | 1.93E+11 | 0.0 | 1660.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.88E+09 | 0.4 | 32620.0 | | | | | | |
| 2338. | ic4h9o2h=ic4h9o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.66E+08 | 1.7 | -3245.0 | | | | | | |
| 2339. | ic4h9o2+ho2=ic4h9o2h+o2 | 1.75E+10 | 0.0 | -3275.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 5.11E+13 | -0.8 | 34480.0 | | | | | | |
| 2340. | ic4h9o2+h2o2=ic4h9o2h+ho2 | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.40E+12 | 0.0 | 10000.0 | | | | | | |
| 2341. | ic4h9o2+ch2o=ic4h9o2h+hco | 1.30E+11 | 0.0 | 9000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 2.50E+10 | 0.0 | 10100.0 | | | | | | |
| 2342. | ic4h9o2+ch3o2=>ic4h9o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | | | | | | |
| 2343. | ic4h9o2+ic4h9o2=>o2+ic4h9o+ic4h9o | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | | | | | | |
| 2344. | ic4h9o2+ho2=>ic4h9o+oh+o2 | 1.40E-14 | -1.6 | 1860.0 | | | | | | |
| 2345. | ic4h9o2+ch3=ic4h9o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.77E+12 | 0.2 | 26240.0 | | | | | | |
| 2346. | ic4h9o2+c2h5=ic4h9o+ch3ch2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.90E+12 | 0.2 | 29180.0 | | | | | | |
| 2347. | ic4h9o2+ic4h9=ic4h9o+ic4h9o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 7.33E+13 | -0.2 | 29370.0 | | | | | | |
| 2348. | ic4h9o2+c3h5-a=ic4h9o+c3h5o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.18E+11 | 0.4 | 14950.0 | | | | | | |
| 2349. | ic4h9o2+ic4h7=ic4h9o+ic4h7o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.27E+11 | 0.4 | 14740.0 | | | | | | |
| 2350. | ic4h9+ho2=ic4h9o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.26E+16 | -0.7 | 26680.0 | | | | | | |
| 2351. | ch3o2+ic4h9=ch3o+ic4h9o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.23E+18 | -1.3 | 31440.0 | | | | | | |
| 2352. | ic4h9o=ic3h7cho+h | 4.00E+14 | 0.0 | 21500.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.14E+10 | 1.1 | 2500.0 | | | | | | |
| 2353. | ic4h9o+ho2=ic3h7cho+h2o2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.38E+13 | -0.2 | 72130.0 | | | | | | |
| 2354. | ic4h9o+oh=ic3h7cho+h2o | 1.81E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 4.21E+13 | 0.1 | 103600.0 | | | | | | |
| 2355. | ic4h9o+ch3=ic3h7cho+ch4 | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 3.37E+14 | 0.1 | 88920.0 | | | | | | |
| 2356. | ic4h9o+o=ic3h7cho+oh | 6.00E+12 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.42E+12 | 0.1 | 86350.0 | | | | | | |
| 2357. | ic4h9o+h=ic3h7cho+h2 | 1.99E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.07E+13 | 0.1 | 88440.0 | | | | | | |
| 2358. | c3h5-t+ch3(+m)=ic4h8(+m) | 2.50E+13 | 0.0 | 0.0 | | | | | | |
| | Low pressure limit: | 0.42700E+59 | -0.11940E+02 | 0.97698E+04 | | | | | | |
| | | | | | TROE centering: | 0.17500E+00 | 0.13406E+04 | 0.60000E+05 | 0.10140E+05 | |
| | | | | | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | |
| | | | | | co | Enhanced by | 1.500E+00 | | | |
| | | | | | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | |
| | | | | | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | |
| | | | | | c2h6 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | |
| | | | | | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | |
| | | | | | c2h2 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | |
| | | | | | c2h4 | Enhanced by | 3.000E+00 | | | |
| | | | | | ar | Enhanced by | 7.000E-01 | | | |
| 2359. | ic4h8=ic4h7+h | | | | | | | 2.13E+76 | -17.3 | 122629.0 |
| 2360. | ic4h8=ic4h7v+h | | | | | | | 7.71E+69 | -16.1 | 140000.0 |
| 2361. | ic4h8+h=ic4h9 | | | | | | | 6.20E+41 | -8.9 | 14637.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2362. | ic4h8+h=ic4h9 | | | | | | | 1.46E+25 | -4.3 | 5247.8 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2363. | ic4h8+h=tc4h9 | | | | | | | 5.30E+56 | -13.1 | 20667.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2364. | ic4h8+h=tc4h9 | | | | | | | 6.11E+26 | -4.4 | 5182.3 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2365. | ic4h8+o2=ho2+ic4h7 | | | | | | | 3.12E+13 | 0.0 | 37450.0 |
| 2366. | ic4h8+o2=ho2+ic4h7v | | | | | | | 2.00E+13 | 0.0 | 62270.0 |
| 2367. | ic4h8+o=oh+ic4h7 | | | | | | | 1.05E+12 | 0.7 | 5884.0 |
| 2368. | ic4h8+o=oh+ic4h7v | | | | | | | 1.20E+11 | 0.7 | 8959.1 |
| 2369. | ic4h8+h=h2+ic4h7 | | | | | | | 7.29E+05 | 2.5 | 4361.2 |
| 2370. | ic4h8+h=h2+ic4h7v | | | | | | | 8.62E+02 | 3.2 | 12167.0 |
| 2371. | ic4h8+oh=h2o+ic4h7 | | | | | | | 4.40E+04 | 2.7 | -827.1 |
| 2372. | ic4h8+oh=h2o+ic4h7v | | | | | | | 1.09E+04 | 2.8 | 1114.2 |
| 2373. | ic4h8+ho2=h2o2+ic4h7 | | | | | | | 2.92E-01 | 4.1 | 12802.0 |
| 2374. | ic4h8+ho2=h2o2+ic4h7v | | | | | | | 9.70E+04 | 2.5 | 24733.2 |
| 2375. | ic4h8+ch3=ch4+ic4h7 | | | | | | | 3.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 2376. | ic4h8+ch3=ch4+ic4h7v | | | | | | | 2.00E+12 | 0.0 | 15000.0 |
| 2377. | ic4h8+ch3o=ch3oh+ic4h7 | | | | | | | 1.68E+11 | 0.0 | 2600.0 |
| 2378. | ic4h8+ch3o2=ch3o2h+ic4h7 | | | | | | | 1.54E-01 | 4.4 | 13547.0 |
| 2379. | ic4h8+c3h5-t=ic4h7+c3h6 | | | | | | | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| 2380. | ic4h8+c3h5-a=ic4h7+c3h6 | | | | | | | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| 2381. | ic4h8+c3h5-s=ic4h7+c3h6 | | | | | | | 7.94E+11 | 0.0 | 20500.0 |
| 2382. | ic4h7=ic4h7v | | | | | | | 9.70E+48 | -11.7 | 73700.0 |
| 2383. | ic4h8+o=ic3h7+hco | | | | | | | 7.45E+06 | 1.9 | 183.0 |
| 2384. | ic4h8+o=>ch2co+ch3+ch3 | | | | | | | 3.05E+06 | 1.9 | 183.0 |
| 2385. | ic4h8+o=>ic3h6co+h+h | | | | | | | 3.05E+06 | 1.9 | 183.0 |
| 2386. | ic4h8+h=ch3+c3h6 | | | | | | | 3.08E+22 | -2.6 | 12898.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2387. | ic4h8+h=ch3+c3h6 | | | | | | | 4.13E+04 | 2.5 | 3679.1 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2388. | ic4h8+oh=proloh1d+ch3 | | | | | | | 9.64E+18 | -1.7 | 13107.0 |
| 2389. | ic4h8+oh=pro2oh1d+ch3 | | | | | | | 3.86E+19 | -1.7 | 13107.0 |
| 2390. | ic4h8+oh=ic4h8oh | | | | | | | 7.58E+53 | -12.2 | 22976.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2391. | ic4h8+oh=ic4h8oh | | | | | | | 6.41E+41 | -9.3 | 8921.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2392. | ic4h8+oh=tc4h8oh | | | | | | | 2.53E+53 | -12.2 | 22976.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2393. | ic4h8+oh=tc4h8oh | | | | | | | 2.14E+41 | -9.3 | 8921.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | | | | | | |
| 2394. | ic4h8oh+o2=ic4h8ohto2 | | | | | | | 5.36E+89 | -24.8 | 22402.0 |
| 2395. | ic4h8oh+o2=ch3coch3+ch2o+oh | | | | | | | 1.80E+38 | -8.1 | 15131.0 |
| 2396. | ic4h8ohto2=ic4h8to2hio | | | | | | | 2.73E+29 | -5.7 | 27243.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|--|-------------|-------|----------|-------|--|-------------|-------------|---------|
| 2491. | c6h6+c3h5-a=c6h5+c3h6 | 2.85E+12 | 0.0 | 28300.0 | 2546. | HEX1245=Mc6h6 | 5.00E+11 | 0.0 | 22081.0 |
| 2492. | c6h6+o2=c6h5+ho2 | 9.00E+07 | 2.0 | 53168.7 | 2547. | Mc6h6=FULVENE | 4.26E+13 | 0.0 | 49282.0 |
| 2493. | c6h6+o2=>c6h5o+oh | 1.00E+14 | 0.0 | 44000.0 | 2548. | Mc6h6=c6h6 | 3.79E+13 | 0.0 | 22000.0 |
| 2494. | c6h6+o=c6h5o+h | 1.99E+07 | 1.8 | 3970.0 | 2549. | c2h2+nc4h5 (+M)=c6h7c (+M) | 4.80E+07 | 0.3 | 4700.0 |
| 2495. | c6h6+ho2=c6h5+h2o2 | 4.20E+01 | 3.6 | 22217.3 | | Low pressure limit: 0.52000E+26 -0.42100E+01 | 0.40000E+04 | | |
| 2496. | c6h5+m=l6h5+m | 3.17E+17 | 0.0 | 67000.0 | 2550. | c4h4+c2h2=c6h5+h | 1.00E+09 | 0.0 | 30010.0 |
| 2497. | 1c6h5=>c2h2+nc4h3 | 1.00E+14 | 0.0 | 38000.0 | 2551. | c6h6+o=cpd+co | 6.02E+15 | -0.5 | 14993.0 |
| 2498. | 1c6h5=>c2h2+c2h2+c2h | 2.00E+14 | 0.0 | 38000.0 | 2552. | c6h6+c2h3=c6h5+c2h4 | 2.00E+12 | 0.0 | 15000.0 |
| 2499. | c6h5+o2=c6h5o+o | 2.60E+13 | 0.0 | 6120.0 | 2553. | cyc6h12=c6h12-1 | 2.82E+20 | -0.7 | 93010.0 |
| 2500. | c6h5+o2=c5h5+co2 | 2.41E+40 | -7.9 | 26448.0 | 2554. | cyc6h11+h (+m)=cyc6h12 (+m) | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2501. | c6h5o+oh=>c6h5+ho2 | 5.00E+12 | 0.0 | 1000.0 | | Low pressure limit: 0.17000E+59 -0.12080E+02 | 0.11264E+05 | | |
| 2502. | c6h5+hco=c6h6+co | 8.55E+04 | 2.2 | 38.0 | | TROE centering: 0.64900E+00 0.12131E+04 | 0.12131E+04 | 0.13370E+05 | |
| 2503. | c6h5>h+c2h2+c4h2 | 4.30E+12 | 0.6 | 77294.0 | 2555. | cyc6h12+o2=cyc6h11+ho2 | 8.00E+13 | 0.0 | 47590.0 |
| 2504. | c6h5+o=>co+c5h5 | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | 2556. | cyc6h12+h=cyc6h11+h2 | 2.70E+10 | 1.4 | 8229.0 |
| 2505. | nc4h3+c2h3=c6h6 | 2.87E+14 | 0.0 | 820.0 | 2557. | cyc6h12+o=cyc6h11+oh | 2.86E+05 | 2.7 | 2106.0 |
| 2506. | c3h5-a+c3h3=FULVENE+h+h | 1.00E+38 | -7.5 | 23880.0 | 2558. | cyc6h12+oh=cyc6h11+h2o | 1.91E+08 | 1.7 | -236.5 |
| 2507. | c4h4+c2h2=c6h6 | 4.47E+11 | 0.0 | 30010.0 | 2559. | cyc6h12+ho2=cyc6h11+h2o2 | 1.12E+05 | 2.5 | 14150.0 |
| 2508. | c4h4+c2h=c6h5 | 3.00E+11 | 0.0 | 0.0 | 2560. | cyc6h12+ch3=cyc6h11+ch4 | 9.06E+00 | 3.5 | 5480.0 |
| 2509. | nc4h5+c2h2=c6h6+h | 1.69E+16 | -1.0 | 8967.0 | 2561. | cyc6h12+c3h5-a=cyc6h11+c3h6 | 4.80E+02 | 3.3 | 18170.0 |
| 2510. | nc4h5+c2h2=FULVENE+h | 1.74E+19 | -1.9 | 12383.0 | 2562. | cyc6h11=c6h1116 | 2.59E+32 | -6.3 | 32020.0 |
| 2511. | ic4h5+c2h2=c6h6+h | 8.25E+24 | -3.8 | 24562.0 | 2563. | cyc6h11+o2=cyc6h10+ho2 | 3.16E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 2512. | ic4h5+c2h2=FULVENE+h | 9.70E+25 | -3.8 | 21326.0 | 2564. | cyc6h11=cyc6h10+h | 5.73E+32 | -6.5 | 32206.0 |
| 2513. | c2h3+nc4h5=c6h6+h2 | 1.84E-13 | 7.1 | -3600.0 | 2565. | cyc6h10=c4h6+c2h4 | 1.15E+12 | 0.9 | 67186.0 |
| 2514. | c3h3+c3h3=FULVENE | 1.26E+56 | -12.6 | 23515.0 | 2566. | cyc6h10=cc6h813+h2 | 5.00E+13 | 0.0 | 61700.0 |
| 2515. | c3h3+c3h3=c6h6 | 3.89E+50 | -11.0 | 20320.0 | 2567. | cyc6h10+o=cc6h914+oh | 5.20E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 2516. | FULVENE=c6h6 | 2.95E+31 | -5.0 | 88465.0 | 2568. | cyc6h10+h=cc6h914+h2 | 1.80E+07 | 2.0 | 5000.0 |
| 2517. | c3h3+c3h3=c6h5+h | 2.02E+33 | -6.0 | 15940.0 | 2569. | cyc6h10+oh=cc6h914+h2o | 5.20E+06 | 2.0 | -770.0 |
| 2518. | FULVENE+h=c6h6+h | 2.20E+27 | -3.5 | 19199.0 | 2570. | cyc6h10+ho2=cc6h914+h2o2 | 6.00E+12 | 0.0 | 15500.0 |
| 2519. | FULVENE=c6h5+h | 8.51E+24 | -2.5 | 113330.0 | 2571. | cyc6h10+ch3=cc6h914+ch4 | 4.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 2520. | FULVENE+h=>c6h5+h2 | 1.42E+08 | 1.8 | 6570.0 | 2572. | cyc6h10+o=cc6h913+oh | 1.80E+11 | 0.7 | 3250.0 |
| 2521. | FULVENE+oh=>c6h5+h2o | 2.02E+03 | 2.9 | 1289.4 | 2573. | cyc6h10+h=cc6h913+h2 | 1.08E+05 | 2.5 | -1900.0 |
| 2522. | FULVENE+o=>c6h5+oh | 7.80E+06 | 2.2 | 9205.6 | 2574. | cyc6h10+oh=cc6h913+h2o | 6.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 2523. | FULVENE+o2=>c6h5+ho2 | 9.00E+07 | 2.0 | 53168.7 | 2575. | cyc6h10+ho2=cc6h913+h2o2 | 6.00E+12 | 0.0 | 13500.0 |
| 2524. | FULVENE+ho2=>c6h5+h2o2 | 4.20E+01 | 3.6 | 22217.3 | 2576. | cyc6h10+ch3=cc6h913+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 2525. | FULVENE+ch3=>c6h5+ch4 | 4.16E+12 | 0.0 | 14628.8 | 2577. | cyc6h10+c3h5-a=cc6h913+c3h6 | 4.80E+02 | 3.3 | 18170.0 |
| 2526. | c6h5o=c5h5+co | 6.90E+23 | -3.0 | 58203.8 | 2578. | cc6h914=c6h9146 | 3.30E+13 | 0.0 | 22500.0 |
| 2527. | c6h5oh (+m)=c6h5o+h (+m) | 3.33E+17 | -0.5 | 91600.7 | 2579. | cc6h914=c6h9156 | 2.00E+13 | 0.0 | 35500.0 |
| | Low pressure limit: 0.25600E+95 -0.28210E+02 | 0.12598E+06 | | | 2580. | cc6h913=cc6h813+h | 1.50E+13 | 0.0 | 50500.0 |
| 2528. | c6h5oh=c6h5+oh | 2.00E+16 | 0.0 | 111000.0 | 2581. | cc6h913=c6h9136 | 1.90E+12 | 0.6 | 45240.0 |
| 2529. | c6h5oh+oh=>c6h5o+h2o | 6.00E+09 | 1.0 | 2405.2 | 2582. | c6h9146=c2h3+c4h6 | 2.00E+13 | 0.0 | 50000.0 |
| 2530. | c6h5oh+ho2=>c6h5o+h2o2 | 3.20E+06 | 2.0 | 18857.8 | 2583. | c6h9146=c6h8135+h | 3.20E+13 | 0.0 | 40700.0 |
| 2531. | c6h5oh+h=c6h5o+h2 | 4.81E+00 | 3.8 | 3923.9 | 2584. | c6h9156=c2h2+c4h714 | 2.00E+13 | 0.0 | 33000.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 6.70E-02 | 4.2 | 19955.4 | 2585. | mcp=ch3+cyc5h9 | 3.59E+45 | -8.6 | 97430.0 |
| 2532. | c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4 | 1.44E+04 | 2.5 | 5049.6 | 2586. | mcp=c6h12-1 | 6.71E+15 | 0.0 | 82840.0 |
| | Reverse Arrhenius coefficients: | 1.90E+04 | 2.8 | 21955.3 | 2587. | mcp=c6h12-2 | 1.68E+15 | 0.0 | 82840.0 |
| 2533. | c6h5oh+o=c6h5o+oh | 2.81E+13 | 0.0 | 7352.0 | 2588. | mcp=pent2m1d | 2.52E+15 | 0.0 | 84840.0 |
| 2534. | c6h5oh+o2=>c6h5o+ho2 | 4.46E+06 | 1.7 | 30497.1 | 2589. | mcp=pent4m1d | 2.52E+15 | 0.0 | 84840.0 |
| 2535. | c6h5o+ho2=>c6h5o+ho2 | 3.25E+05 | 1.8 | -4223.0 | 2590. | mcp=pent3m1d | 2.52E+15 | 0.0 | 84840.0 |
| 2536. | c6h5o+h=co+cpd | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 2591. | mcp=c3h6+c3h6 | 1.78E+16 | 0.0 | 95060.0 |
| 2537. | c6h5o+oh=>co+hco+nc4h5 | 5.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 2592. | mcp+o2=mcpm+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 50930.0 |
| 2538. | c6h5o+ho2=>oh+co+hco+nc4h5 | 1.00E+12 | 0.0 | 6000.0 | 2593. | mcp+o2=mcpt+ho2 | 4.00E+13 | 0.0 | 44000.0 |
| 2539. | c6h5o+o=>co+co+nc4h5 | 3.00E+14 | 0.0 | 0.0 | 2594. | mcp+o2=mcps1+ho2 | 8.00E+13 | 0.0 | 47590.0 |
| 2540. | c6h5oh=cpd+co | 8.62E+15 | -0.6 | 74115.0 | 2595. | mcp+o2=mcps2+ho2 | 8.00E+13 | 0.0 | 47590.0 |
| 2541. | c6h5oh+c2h3=c6h5o+c2h4 | 6.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 2596. | mcpm+h (+m)=mcp (+m) | 3.60E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2542. | c3h3+c3h3=c6h615 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | | Low pressure limit: 0.15000E+49 -0.93200E+01 | 0.58340E+04 | | |
| 2543. | nc4h3+c2h2=c6h5 | 7.00E+14 | -0.9 | 6400.0 | | TROE centering: 0.49800E+00 0.13140E+04 | 0.13140E+04 | 0.50000E+05 | |
| 2544. | c3h3+c3h2=c6h5 | 7.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 2597. | mcpt+h (+m)=mcp (+m) | 2.40E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 2545. | c6h615=HEX1245 | 5.40E+11 | 0.0 | 35804.0 | | Low pressure limit: 0.14700E+62 -0.12940E+02 | 0.80000E+04 | | |

| | | | | | | | | | | |
|-------|-----------------------------|-------------|--------------|-------------|-------------|-------------------------|--------------------------------|----------|---------|----------|
| 2748. | cyc5h8+c2h3=cyc5h7+c2h4 | 4.00E+11 | 0.0 | 16800.0 | 2799. | c5h5+ho2=c5h5ooh | 1.08E+50 | -11.9 | 9210.0 | |
| 2749. | cyc5h8+c2h5=cyc5h7+c2h6 | 8.80E+00 | 3.5 | 4140.0 | 2800. | c5h5ooh=c5h5o24+oh | 1.59E+20 | -1.5 | 42857.5 | |
| 2750. | cyc5h8+c3h5-a=cyc5h7+c3h6 | 4.00E+01 | 3.3 | 18170.0 | 2801. | c5h5+ho2=>oh+co+nc4h5 | 5.00E+11 | 0.0 | 0.0 | |
| 2751. | cyc5h8+c5h7=cyc5h7+c5h813 | 3.20E+02 | 3.3 | 18170.0 | 2802. | c5h5+ho2=>oh+hco+c4h4 | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 | |
| 2752. | cyc5h8+c5h5=cyc5h7+cpd | 1.60E+11 | 0.0 | 12400.0 | 2803. | c5h5+oh=>co+c2h4+c2h2 | 2.00E+14 | 0.2 | 4350.0 | |
| 2753. | cyc5h8=cpd+h2 | 2.24E+13 | 0.0 | 60010.0 | 2804. | c5h5+oh=>h+ch2co+c3h3 | 3.50E+13 | 0.2 | 4350.0 | |
| 2754. | cyc5h8+o2=cyc5h7+ho2 | 2.80E+12 | 0.0 | 35600.0 | 2805. | c5h5+oh=c5h4oh+h | 1.06E+12 | 0.8 | 15960.0 | |
| 2755. | cyc5h8=c5h813 | 1.15E+20 | -0.9 | 86230.0 | 2806. | c5h5+oh=c4h6+co | 1.16E+20 | -1.8 | 16780.0 | |
| 2756. | cyc5h8+cyc5h8=cyc5h7+cyc5h9 | 2.53E+14 | 0.0 | 55240.0 | 2807. | c5h5+oh=a-acyc5h5o+h | 4.12E+14 | -0.1 | 18980.0 | |
| 2757. | cpd+h=cyc5h7 | 1.10E-03 | 3.6 | -14070.0 | 2808. | c5h5+oh=b-acyc5h5o+h | 6.73E+13 | 0.2 | 13690.0 | |
| 2758. | cpd+ho2=cyc5h7+o2 | 2.85E-04 | 4.5 | 10999.2 | 2809. | c4h4o+h=c3h5-a+co | 6.60E+13 | -0.0 | 2740.0 | |
| 2759. | cyc5h7+o2=c2h3cho+ch2cho | 1.70E+09 | 1.0 | 26230.0 | 2810. | c4h4o+h=c3h5-a+co | Declared duplicate reaction... | | | |
| 2760. | cyc5h7+oh=cpd+h2o | 6.02E+12 | 0.0 | 0.0 | 2811. | c4h4o+o=ch2cho+hcco | Declared duplicate reaction... | | | |
| 2761. | cyc5h7+o=cpd+oh | 1.80E+13 | 0.0 | 0.0 | 2812. | c4h4o+oh=c3h5-a+co2 | 3.00E+08 | 1.4 | -860.0 | |
| 2762. | cyc5h7+h=cpd+h2 | 1.80E+13 | 0.0 | 0.0 | 2813. | c5h5o24=c5h4o+c | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 | |
| 2763. | cyc5h7+h=cyc5h8 | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | 2814. | c5h5o24=nc4h5+co | 5.06E+18 | -2.5 | 9508.0 | |
| 2764. | cyc5h7+o=c4h6+hco | 8.26E+13 | 0.0 | 0.0 | 2815. | c5h5o24=nc4h5+co | 1.10E+79 | -19.6 | 66250.0 | |
| 2765. | c5h7=cyc5h7 | 7.89E+11 | 0.3 | 35600.0 | 2816. | c5h5o24+o2=c5h4o+ho2 | 1.00E+11 | 0.0 | 0.0 | |
| 2766. | c5h5+h=cpd | 2.71E+63 | -14.8 | 21050.0 | 2817. | nc4h5+co=c4h5co | 1.51E+11 | 0.0 | 4810.0 | |
| 2767. | cpd(+M)=c2h2+c3h4-a(+M) | 3.80E+17 | 0.0 | 104000.0 | 2818. | chchcho=c2h3co | 1.40E+09 | 1.0 | 32100.0 | |
| | Low pressure limit: | 0.10000E+99 | -0.22250E+02 | 0.12632E+06 | 2819. | c2h2+hco=chchcho | 7.77E+06 | 1.4 | 7755.0 | |
| | TROE centering: | 0.14410E+00 | 0.53580E+01 | 0.32840E+04 | 0.67100E+10 | 2820. | c5h4oh=co+nc4h5 | 5.69E+45 | -9.2 | 77650.0 |
| | co | Enhanced by | 1.500E+00 | | | 2821. | c5h4oh+h=c5h5oh | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 |
| | co2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | 2822. | c5h4oh+h=c5h4o+h2 | 2.10E+13 | 0.0 | 54000.0 |
| | h2o | Enhanced by | 6.000E+00 | | | 2823. | c5h4oh+o2=c5h4o+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 5000.0 |
| | h2 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | 2824. | c5h4o=co+c2h2+c2h2 | 5.46E+29 | -4.3 | 87430.0 |
| | ch4 | Enhanced by | 2.000E+00 | | | 2825. | c5h4o=co+c4h4 | 6.34E+35 | -5.9 | 107500.0 |
| 2768. | c3h4-p+c2h3=cpd+h | 5.00E+11 | 0.0 | 3000.0 | 2826. | c5h4o+h=nc4h5+co | 8.82E+28 | -3.9 | 19590.0 | |
| 2769. | c3h4-a+c2h3=cpd+h | 5.00E+11 | 0.0 | 3000.0 | 2827. | c5h4o+h=c5h4oh | 1.47E+30 | -4.7 | 14650.0 | |
| 2770. | c3h3+c2h4=cpd+h | 5.00E+10 | 0.0 | 20400.0 | 2828. | c5h4o+h=c5h3o+h2 | 2.00E+12 | 0.0 | 8100.0 | |
| 2771. | cpd+h=c5h5+h2 | 5.60E+12 | 0.0 | 9453.0 | 2829. | c5h4o+o=c5h3o+oh | 1.40E+13 | 0.0 | 1470.0 | |
| 2772. | cpd+h=c5h7 | 1.14E+14 | -0.2 | 3100.0 | 2830. | c5h4o+o=co+hco+c3h3 | 1.20E+08 | 1.4 | -858.0 | |
| 2773. | cpd+o=c5h5+oh | 1.35E+07 | 2.0 | 2579.5 | 2831. | c5h4o+oh=c5h3o+h2o | 1.10E+08 | 1.4 | 1450.0 | |
| 2774. | cpd+o=nc4h5+co+h | 8.70E+51 | -11.1 | 33240.0 | 2832. | c5h3o+h=c5h4o | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | |
| 2775. | cpd+o=c4h6+co | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 2833. | c5h3o=>c2h2+co+c2h | 2.00E+13 | 0.0 | 51000.0 | |
| 2776. | cpd+o=b-acyc5h5o+h | 8.91E+12 | -0.1 | 590.0 | 2834. | nc4h5+c3h4-a=toluen+h | 2.00E+11 | 0.0 | 3700.0 | |
| 2777. | cpd+o=a-acyc5h5o+h | 5.60E+12 | -0.1 | 200.0 | 2835. | nc4h5+c3h4-p=toluen+h | 6.32E+11 | 0.0 | 3700.0 | |
| 2778. | cpd+o=ch2co+c3h4-a | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 2836. | c3h3+c4h6=toluen+h | 3.27E+05 | 1.3 | -4611.0 | |
| 2779. | cpd+o=ch2co+c3h4-p | 3.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 2837. | toluen=c6h5+ch3 | 1.40E+16 | 0.0 | 99800.0 | |
| 2780. | cpd+oh=c5h5+h2o | 1.00E+14 | 0.0 | 1714.0 | 2838. | toluen=phch2+h | 3.00E+15 | 0.0 | 88194.0 | |
| 2781. | cpd+ho2=c5h5+h2o2 | 1.22E-09 | 6.3 | 7591.3 | 2839. | toluen+o2=phch2+ho2 | 3.00E+14 | 0.0 | 43062.0 | |
| 2782. | cpd+hco=c5h5+ch2o | 1.08E+08 | 1.9 | 16000.0 | 2840. | toluen+ho2=phch2+h2o2 | 3.00E+14 | 0.0 | 22010.0 | |
| 2783. | cpd+ch3=c5h5+ch4 | 1.60E+03 | 2.9 | 4300.0 | 2841. | toluen+oh=phch2+h2o | 1.77E+05 | 2.4 | -602.0 | |
| 2784. | cpd+c2h3=c5h5+c2h4 | 1.20E-01 | 4.0 | 0.0 | 2842. | toluen+oh=c6h5oh+ch3 | 7.83E+02 | 2.9 | 3221.0 | |
| 2785. | cpd+c3h5-a=c5h5+c3h6 | 2.41E+05 | 2.0 | 15253.3 | 2843. | toluen+o=phch2+oh | 6.30E+11 | 0.0 | 0.0 | |
| 2786. | cpd+h>c3h5-a+c2h2 | 7.74E+36 | -6.2 | 32890.0 | 2844. | toluen+h=phch2+h2 | 6.47E+00 | 4.0 | 3384.0 | |
| 2787. | c5h5=1c5h5 | 1.84E+94 | -24.4 | 79300.0 | 2845. | toluen+h=c6h6+ch3 | 3.90E+08 | 1.2 | 2371.0 | |
| 2788. | 1c5h5=c3h3+c2h2 | 1.01E+68 | -16.1 | 83000.0 | 2846. | toluen+ch3=phch2+ch4 | 8.88E+10 | 0.0 | 8754.0 | |
| 2789. | c5h5=>c3h3+c2h2 | 2.00E+12 | 0.0 | 68000.0 | 2847. | toluen+c2h5=phch2+c2h6 | 1.01E+11 | 0.0 | 9514.0 | |
| 2790. | c3h3+c2h2=>c5h5 | 7.55E+99 | -24.4 | 128200.0 | 2848. | toluen+c6h5=phch2+c6h6 | 2.10E+12 | 0.0 | 4400.0 | |
| 2791. | c5h5+o2=c5h4o+cho | 8.77E+01 | 3.1 | 23496.0 | 2849. | toluen+nc4h5=phch2+c4h6 | 4.00E+12 | 0.0 | 7500.0 | |
| 2792. | c5h5+o2=c2h3chcho+co | 2.19E+09 | 0.5 | 24058.0 | 2850. | toluen+c2h3=phch2+c2h4 | 4.00E+12 | 0.0 | 7500.0 | |
| 2793. | c5h5+o2=c4h4o+hco | 2.62E+13 | -0.7 | 27939.0 | 2851. | c5h5+c2h2=phch2 | 1.40E+17 | -1.3 | 31000.0 | |
| 2794. | c5h5+o2=c5h5o24+o | 1.06E+15 | -0.3 | 51792.0 | 2852. | phch2+o2=phhco+oh | 6.31E+12 | 0.0 | 43000.0 | |
| 2795. | c5h5+o=nc4h5+co | 5.75E+14 | -0.3 | 6180.0 | 2853. | phch2+ho2=phch2o+oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 | |
| 2796. | c5h5+o=c5h4o+h | 2.79E+13 | -0.1 | 2720.0 | 2854. | phch2+oh=phch2oh | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 | |
| 2797. | c5h5+ho2=c5h5o24+oh | 6.86E+10 | 0.3 | 5088.6 | | | | | | |
| 2798. | c5h5+ho2=c5h4o+h2o | 1.19E+33 | -6.5 | 13400.0 | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|-------|---------------------------------|----------|------|---------|-------|-----------------------------------|----------|------|---------|
| 3188. | c5h814+ho2=>c2h3cho+c2h4+oh | 5.00E+11 | 0.0 | 19000.0 | 3246. | pent2o2h3*o=>c2h5co+ch3cho+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 |
| 3189. | c5h814+ho2=>c4h6+ch2o+oh | 5.00E+11 | 0.0 | 19000.0 | 3247. | pent1o2h2j=pentcy1o2+oh | 7.34E+09 | 0.9 | 10900.0 |
| 3190. | c5h814+h=c5h7+h2 | 7.00E+06 | 2.0 | 0.0 | 3248. | pent1o2h3j=pentcy1o3+oh | 8.45E+08 | 0.9 | 15300.0 |
| 3191. | c5h814+oh=c5h7+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 3249. | pent1o2h4j=pentcy1o4+oh | 4.82E+07 | 0.9 | 9000.0 |
| 3192. | c5h814+ho2=c5h7+h2o2 | 2.00E+11 | 0.0 | 12600.0 | 3250. | pent1o2h5j=pentcy1o5+oh | 2.89E+07 | 0.8 | 11300.0 |
| 3193. | c5h814+ch3=c5h7+ch4 | 2.00E+14 | 0.0 | 22800.0 | 3251. | pent2o2h1j=pentcy1o2+oh | 1.16E+11 | 0.4 | 10700.0 |
| 3194. | c5h7+o2=c2h3chcho+c2h2o | 1.70E+09 | 1.0 | 26400.0 | 3252. | pent2o2h3j=pentcy2o3+oh | 4.44E+09 | 0.9 | 9389.0 |
| 3195. | c5h7+o2=ch2cho+c2h3cho | 1.70E+09 | 1.0 | 26400.0 | 3253. | pent2o2h4j=pentcy2o4+oh | 2.41E+09 | 0.7 | 15402.0 |
| 3196. | c5h7+o=c2h3cho+c2h3 | 5.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3254. | pent2o2h5j=pentcy1o4+oh | 2.48E+09 | 0.3 | 11200.0 |
| 3197. | c5h7+oh=c2h3cho+c2h4 | 2.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3255. | pent3o2h1j=pentcy1o3+oh | 2.03E+10 | 0.5 | 17700.0 |
| 3198. | c5h11-1+o2=pent1o2 | 6.86E+16 | -1.6 | 198.7 | 3256. | pent3o2h2j=pentcy2o3+oh | 1.34E+10 | 0.8 | 9583.0 |
| 3199. | c5h11-2+o2=pent2o2 | 3.49E+14 | -0.8 | -536.5 | 3257. | pentcy1o2+oh=>ch2co+nc3h7+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3200. | c5h11-3+o2=pent3o2 | 3.49E+14 | -0.8 | -536.5 | 3258. | pentcy1o2+oh=>c2h3cho+c2h5+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3201. | pent1o2=c5h10-1+ho2 | 2.58E+07 | 1.6 | 28500.0 | 3259. | pentcy1o3+oh=>c2h5co+c2h4+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3202. | pent2o2=c5h10-1+ho2 | 2.40E+09 | 1.1 | 30100.0 | 3260. | pentcy1o3+oh=>hco+c4h8-1+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3203. | pent2o2=c2c5h10+ho2 | 2.57E+09 | 1.0 | 29362.0 | 3261. | pentcy1o4+oh=>ch2cho+c3h6+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3204. | pent2o2=t2c5h10+ho2 | 2.57E+09 | 1.0 | 29362.0 | 3262. | pentcy1o4+oh=>ch3coch2+c2h4+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3205. | pent3o2=c2c5h10+ho2 | 3.60E+10 | 0.7 | 29883.0 | 3263. | pentcy1o5+oh=>pc2h4cho+c2h4+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3206. | pent3o2=t2c5h10+ho2 | 3.60E+10 | 0.7 | 29883.0 | 3264. | pentcy1o5+oh=>ch2o+c4h713+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3207. | pent1o2=pent1o2h2j | 4.01E+08 | 1.1 | 30100.0 | 3265. | pentcy2o3+oh=>ch3cho+c2h5+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3208. | pent1o2=pent1o2h3j | 1.36E+07 | 1.3 | 18200.0 | 3266. | pentcy2o3+oh=>c2h3coch3+ch3+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3209. | pent1o2=pent1o2h4j | 3.72E+06 | 1.2 | 16600.0 | 3267. | pentcy2o4+oh=>ch3co+c3h6+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3210. | pent1o2=pent1o2h5j | 2.94E+05 | 1.5 | 19900.0 | 3268. | pentcy2o4+oh=>ch3cho+c3h5-s+h2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3211. | pent2o2=pent2o2h1j | 1.46E+09 | 1.1 | 33500.0 | 3269. | pentcy1o2+ho2=>ch2co+nc3h7+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3212. | pent2o2=pent2o2h3j | 1.72E+09 | 0.9 | 29500.0 | 3270. | pentcy1o2+ho2=>c2h3cho+c2h5+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3213. | pent2o2=pent2o2h4j | 7.03E+10 | 0.2 | 18500.0 | 3271. | pentcy1o3+ho2=>c2h5co+c2h4+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3214. | pent2o2=pent2o2h5j | 1.23E+06 | 1.5 | 20000.0 | 3272. | pentcy1o3+ho2=>hco+c4h8-1+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3215. | pent3o2=pent3o2h2j | 2.88E+07 | 1.4 | 20800.0 | 3273. | pentcy1o4+ho2=>ch2cho+c3h6+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3216. | pent3o2=pent3o2h1j | 3.43E+09 | 0.9 | 29500.0 | 3274. | pentcy1o4+ho2=>ch3coch2+c2h4+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3217. | pent1o2h2j+o2=pent1o2h2o2 | 1.57E+14 | -0.8 | -536.5 | 3275. | pentcy1o5+ho2=>pc2h4cho+c2h4+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3218. | pent1o2h3j+o2=pent1o2h3o2 | 1.57E+14 | -0.8 | -536.5 | 3276. | pentcy1o5+ho2=>ch2o+c4h713+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3219. | pent1o2h4j+o2=pent1o2h4o2 | 1.57E+14 | -0.8 | -536.5 | 3277. | pentcy2o3+ho2=>ch3cho+c2h5+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3220. | pent1o2h5j+o2=pent1o2h5o2 | 3.09E+16 | -1.6 | 198.7 | 3278. | pentcy2o3+ho2=>c2h3coch3+ch3+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3221. | pent2o2h1j+o2=pent2o2h1o2 | 3.09E+16 | -1.6 | 198.7 | 3279. | pentcy2o4+ho2=>ch3co+c3h6+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3222. | pent2o2h3j+o2=pent2o2h3o2 | 1.57E+14 | -0.8 | -536.5 | 3280. | pentcy2o4+ho2=>ch3cho+c3h5-s+h2o2 | 5.00E+12 | 0.0 | 17700.0 |
| 3223. | pent2o2h4j+o2=pent2o2h4o2 | 1.57E+14 | -0.8 | -536.5 | 3281. | pent1o2h2j=c5h10-1+ho2 | 1.04E+10 | 0.9 | 15100.0 |
| 3224. | pent2o2h5j+o2=pent2o2h5o2 | 3.09E+16 | -1.6 | 198.7 | 3282. | pent2o2h1j=c5h10-1+ho2 | 2.21E+12 | 0.2 | 15600.0 |
| 3225. | pent3o2h1j+o2=pent3o2h1o2 | 3.09E+16 | -1.6 | 198.7 | 3283. | pent2o2h3j=c2c5h10+ho2 | 2.27E+10 | 0.8 | 15100.0 |
| 3226. | pent3o2h2j+o2=pent3o2h2o2 | 1.57E+14 | -0.8 | -536.5 | 3284. | pent3o2h2j=c2c5h10+ho2 | 2.03E+10 | 0.7 | 15034.0 |
| 3227. | pent1o2h2o2=pent2o2h1*o+oh | 2.44E+07 | 1.6 | 27900.0 | 3285. | pent2o2h3j=t2c5h10+ho2 | 2.27E+10 | 0.8 | 15100.0 |
| 3228. | pent1o2h3o2=pent3o2h1*o+oh | 1.10E+04 | 2.4 | 19900.0 | 3286. | pent3o2h2j=t2c5h10+ho2 | 2.03E+10 | 0.7 | 15034.0 |
| 3229. | pent1o2h4o2=pent4o2h1*o+oh | 1.26E+03 | 2.2 | 17400.0 | 3287. | pent1o2h2j=>c2h5+c3h5-aooh | 2.41E+10 | 1.0 | 28200.0 |
| 3230. | pent1o2h5o2=pent5o2h1*o+oh | 1.12E+03 | 1.8 | 16600.0 | 3288. | pent1o2h3j=>c4h8-1+ch2o+oh | 9.10E+08 | 1.4 | 25500.0 |
| 3231. | pent2o2h1o2=pent1o2h2*o+oh | 2.76E+08 | 1.2 | 25700.0 | 3289. | pent1o2h4j=>c3h6+c2h4o2h | 5.08E+11 | 0.7 | 28700.0 |
| 3232. | pent2o2h3o2=pent3o2h2*o+oh | 1.75E+08 | 1.7 | 26000.0 | 3290. | pent2o2h4j=>c3h6+c3cho+oh | 1.18E+09 | 1.2 | 22700.0 |
| 3233. | pent2o2h4o2=pent4o2h2*o+oh | 1.75E+02 | 3.1 | 17500.0 | 3291. | pent2o2h5j=>c2h4+prooh2-1 | 6.86E+13 | 0.1 | 29000.0 |
| 3234. | pent2o2h5o2=pent5o2h2*o+oh | 3.77E+02 | 2.2 | 15300.0 | 3292. | pent3o2h1j=>c2h4+c2h5cho+oh | 3.10E+18 | -1.7 | 26820.0 |
| 3235. | pent3o2h1o2=pent1o2h3*o+oh | 5.79E+01 | 2.9 | 17000.0 | 3293. | pent1o2+c5h11-1=pent1o+pent1o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3236. | pent3o2h2o2=pent2o2h3*o+oh | 1.75E+08 | 1.7 | 26000.0 | 3294. | pent1o2+c5h11-2=pent1o+pent2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3237. | pent2o2h1*o=>hco+nc3h7cho+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3295. | pent1o2+c5h11-3=pent1o+pent3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3238. | pent3o2h1*o=>ch2cho+c2h5cho+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3296. | pent2o2+c5h11-1=pent2o+pent1o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3239. | pent4o2h1*o=>pc2h4cho+ch3cho+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3297. | pent2o2+c5h11-2=pent2o+pent2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3240. | pent5o2h1*o=>c3h6cho-4+ch2o+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3298. | pent2o2+c5h11-3=pent2o+pent3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3241. | pent1o2h2*o=>nc3h7co+ch2o+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3299. | pent3o2+c5h11-1=pent3o+pent1o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3242. | pent3o2h2*o=>ch3co+c2h5cho+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3300. | pent3o2+c5h11-2=pent3o+pent2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3243. | pent4o2h2*o=>ch3coch2+ch3cho+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3301. | pent3o2+c5h11-3=pent3o+pent3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3244. | pent5o2h2*o=>ch2o+acetoch2+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3302. | c5h11-1+ho2=pent1o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |
| 3245. | pent1o2h3*o=>c2h5coch2+ch2o+oh | 2.50E+15 | 0.0 | 43000.0 | 3303. | c5h11-2+ho2=pent2o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|------------------------------|----------|------|---------|-------|----------------------------|----------|------|---------|
| 3420. | nc6h14+c2h3=c6h13-2+c2h4 | 8.00E+11 | 0.0 | 16800.0 | 3478. | c6h12-1+ho2=c6h1115+h2o2 | 1.94E+04 | 2.5 | 14170.0 |
| 3421. | nc6h14+c2h3=c6h13-3+c2h4 | 8.00E+11 | 0.0 | 16800.0 | 3479. | c6h12-1+ho2=c6h1114+h2o2 | 1.94E+04 | 2.5 | 14170.0 |
| 3422. | nc6h14+c2h5=c6h13-1+c2h6 | 1.02E+11 | 0.0 | 13400.0 | 3480. | c6h12-1+ho2=c6h1113+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3423. | nc6h14+c2h5=c6h13-2+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 10400.0 | 3481. | c6h12-1+ch3=c6h1116+ch4 | 3.00E-01 | 4.0 | 8200.0 |
| 3424. | nc6h14+c2h5=c6h13-3+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 10400.0 | 3482. | c6h12-1+ch3=c6h1115+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 3425. | nc6h14+c3h5-a=c6h13-1+c3h6 | 2.40E+02 | 3.3 | 19840.0 | 3483. | c6h12-1+ch3=c6h1114+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 3426. | nc6h14+c3h5-a=c6h13-2+c3h6 | 1.60E+02 | 3.3 | 18170.0 | 3484. | c6h12-1+ch3=c6h1113+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 3427. | nc6h14+c3h5-a=c6h13-3+c3h6 | 1.60E+02 | 3.3 | 18170.0 | 3485. | c6h12-1+ch3o=c6h1116+ch3oh | 1.62E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 3428. | c6h13-1=c6h13-2 | 2.29E+01 | 2.8 | 10760.0 | 3486. | c6h12-1+ch3o=c6h1115+ch3oh | 1.44E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 3429. | c6h13-1=c6h13-3 | 5.13E+00 | 3.2 | 16850.0 | 3487. | c6h12-1+ch3o=c6h1114+ch3oh | 1.44E+11 | 0.0 | 4500.0 |
| 3430. | c6h13-2+o2=>ch3cho+c4h8-1+oh | 2.10E+11 | 0.0 | 6858.0 | 3488. | c6h12-1+ch3o=c6h1113+ch3oh | 1.78E+12 | 0.0 | 1200.0 |
| 3431. | c6h13-2+ho2=>ch3cho+pc4h9+oh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3489. | c6h12-1+h=c3h6+nc3h7 | 4.31E+23 | -2.7 | 9830.2 |
| 3432. | c6h13-2+oh=c6h12-1+h2o | 3.64E+13 | 0.0 | 0.0 | 3490. | c6h12-1+h=c2h4+pc4h9 | 3.25E+22 | -2.5 | 11048.4 |
| 3433. | c6h13-2+o=c6h13cho+pc4h9 | 1.61E+13 | 0.0 | 0.0 | 3491. | c6h12-2+c2h5+c4h713 | 1.00E+16 | 0.0 | 70746.0 |
| 3434. | c6h13-2=c3h6+nc3h7 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 | 3492. | c6h12-2=ch3+c5h914 | 7.90E+22 | -1.8 | 88630.0 |
| 3435. | c6h13-2=c6h12-1+h | 1.00E+13 | 0.0 | 39000.0 | 3493. | c6h12-1+o=c5h10-1+ch2o | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3436. | c6h13-2+o2=c6h12-1+ho2 | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 | 3494. | c6h12-1+o=c4h8-1+ch3cho | 2.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3437. | c6h13-2+o2=c6h12-2+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 7500.0 | 3495. | c6h12-2+h=c6h1126+h2 | 2.80E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 3438. | c6h13-2+ch3=c6h12-1+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3496. | c6h12-2+h=c6h1125+h2 | 9.00E+06 | 2.0 | 5000.0 |
| 3439. | c6h13-2+c2h5=c6h12-1+c2h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3497. | c6h12-2+h=c6h1124+h2 | 1.00E+03 | 2.0 | 4445.0 |
| 3440. | c6h13-2+c2h3=c6h12-1+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3498. | c6h12-2+h=c6h1113+h2 | 1.74E+05 | 2.5 | 2510.0 |
| 3441. | c6h13-2+c3h5-a=c6h12-1+c3h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3499. | c6h12-2+o=c6h1126+oh | 4.15E+02 | 3.5 | 3092.0 |
| 3442. | c6h13-3=c5h10-1+ch3 | 2.00E+13 | 0.0 | 31000.0 | 3500. | c6h12-2+o=c6h1125+oh | 2.25E+03 | 3.3 | 1653.0 |
| 3443. | c6h13-3=c4h8-1+c2h5 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 | 3501. | c6h12-2+o=c6h1124+oh | 4.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 3444. | c6h13-3+o2=c6h12-2+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 7500.0 | 3502. | c6h12-2+o=c6h1113+oh | 1.74E+11 | 0.7 | 5900.0 |
| 3445. | c6h13-3+o2=c6h12-3+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 7500.0 | 3503. | c6h12-2+oh=c6h1126+h2o | 2.67E+06 | 2.0 | 450.0 |
| 3446. | c6h13-1+o=c5h11-1+ch2o | 1.61E+13 | 0.0 | 0.0 | 3504. | c6h12-2+oh=c6h1125+h2o | 2.60E+06 | 2.0 | -770.0 |
| 3447. | c6h13-1=c2h4+pc4h9 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 | 3505. | c6h12-2+oh=c6h1124+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3448. | c6h13-1+h=c6h12-1+h2 | 1.81E+12 | 0.0 | 0.0 | 3506. | c6h12-2+oh=c6h1113+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -298.0 |
| 3449. | c6h13-1=c6h12-1+h | 1.50E+13 | 0.0 | 38000.0 | 3507. | c6h12-2+ho2=c6h1126+h2o2 | 5.60E+12 | 0.0 | 19400.0 |
| 3450. | c6h13-1+o2=c6h12-1+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 3508. | c6h12-2+ho2=c6h1125+h2o2 | 4.00E+11 | 0.0 | 15000.0 |
| 3451. | c6h13-1+oh=c6h12-1+h2o | 2.43E+13 | 0.0 | 0.0 | 3509. | c6h12-2+ho2=c6h1124+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 3452. | c6h13-1+ch3=c6h12-1+ch4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3510. | c6h12-2+ho2=c6h1113+h2o2 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 |
| 3453. | c6h13-1+c2h5=c6h12-1+c2h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3511. | c6h12-2+ch3=c6h1126+ch4 | 1.47E+12 | 0.0 | 11722.0 |
| 3454. | c6h13-1+c2h3=c6h12-1+c2h4 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3512. | c6h12-2+ch3=c6h1125+ch4 | 6.60E+11 | 0.0 | 10120.0 |
| 3455. | c6h13-1+c3h5-a=c6h12-1+c3h6 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 3513. | c6h12-2+ch3=c6h1124+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 3456. | c6h12-1=nc3h7+c3h5-a | 1.46E+27 | -3.0 | 78550.0 | 3514. | c6h12-2+ch3=c6h1113+ch4 | 2.20E+00 | 3.5 | 5670.0 |
| 3457. | c2h3+pc4h9=c6h12-1 | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3515. | c6h12-3+h=c6h1131+h2 | 5.60E+07 | 2.0 | 7700.0 |
| 3458. | c6h12-1=c2h5+c4h714 | 1.58E+17 | 0.0 | 87040.0 | 3516. | c6h12-3+h=c6h1124+h2 | 3.90E+13 | 0.0 | 4445.0 |
| 3459. | c6h12-1=c3h5+c5h915 | 7.90E+22 | -1.8 | 88630.0 | 3517. | c6h12-3+o=c6h1131+oh | 9.30E+02 | 3.5 | 3092.0 |
| 3460. | c6h12-1=c3h6+c3h6 | 3.98E+12 | 0.0 | 57430.0 | 3518. | c6h12-3+o=c6h1124+oh | 8.00E+13 | 0.0 | 4000.0 |
| 3461. | c6h12-1+o2=c6h1116+ho2 | 3.97E+13 | 0.0 | 50870.0 | 3519. | c6h12-3+oh=c6h1131+h2o | 5.34E+06 | 2.0 | 450.0 |
| 3462. | c6h12-1+o2=c6h1115+ho2 | 3.97E+13 | 0.0 | 47690.0 | 3520. | c6h12-3+oh=c6h1124+h2o | 6.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3463. | c6h12-1+o2=c6h1114+ho2 | 3.97E+13 | 0.0 | 47690.0 | 3521. | c6h12-3+ho2=c6h1131+h2o2 | 1.12E+13 | 0.0 | 19400.0 |
| 3464. | c6h12-1+o2=c6h1113+ho2 | 7.00E+11 | 0.0 | 34970.0 | 3522. | c6h12-3+ho2=c6h1124+h2o2 | 1.28E+04 | 2.6 | 12400.0 |
| 3465. | c6h12-1+h=c6h1116+h2 | 9.40E+04 | 2.8 | 6280.0 | 3523. | c6h12-3+ch3=c6h1131+ch4 | 2.94E+12 | 0.0 | 11722.0 |
| 3466. | c6h12-1+h=c6h1115+h2 | 1.01E+04 | 2.9 | 2931.0 | 3524. | c6h12-3+ch3=c6h1124+ch4 | 5.60E+11 | 0.0 | 6800.0 |
| 3467. | c6h12-1+h=c6h1114+h2 | 1.01E+04 | 2.9 | 2931.0 | 3525. | c6h12-1=c6h1113+h | 4.08E+18 | -1.0 | 97350.0 |
| 3468. | c6h12-1+h=c6h1113+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 | 3526. | c6h12-1+o=c5h11-1+hco | 1.00E+11 | 0.0 | -1050.0 |
| 3469. | c6h12-1+o=c6h1116+oh | 9.65E+04 | 2.7 | 3716.0 | 3527. | c6h12-1+oh=c5h11-1+ch2o | 1.37E+11 | 0.0 | -1040.0 |
| 3470. | c6h12-1+o=c6h1115+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 | 3528. | c6h12-1+oh=nc4h9cho+ch3 | 1.37E+11 | 0.0 | -1040.0 |
| 3471. | c6h12-1+o=c6h1114+oh | 4.77E+04 | 2.7 | 2106.0 | 3529. | c6h12-2+oh=pc4h9+ch3cho | 1.37E+11 | 0.0 | -1040.0 |
| 3472. | c6h12-1+o=c6h1113+oh | 4.00E+13 | 0.0 | 4000.0 | 3530. | c6h12-2+oh=nc3h7cho+c2h5 | 1.37E+11 | 0.0 | -1040.0 |
| 3473. | c6h12-1+oh=c6h1116+h2o | 1.37E+07 | 1.8 | 868.3 | 3531. | c6h12-3+oh=c2h5cho+nc3h7 | 2.74E+11 | 0.0 | -1040.0 |
| 3474. | c6h12-1+oh=c6h1115+h2o | 7.05E+09 | 0.9 | 504.7 | 3532. | c6h1116=c6h1111 | 9.87E+07 | 1.0 | 20200.0 |
| 3475. | c6h12-1+oh=c6h1114+h2o | 5.72E+06 | 1.8 | -1015.0 | 3533. | c6h1111=c6h1115 | 5.75E+08 | 1.0 | 12400.0 |
| 3476. | c6h12-1+oh=c6h1113+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 3534. | c6h1116=c6h1112 | 4.94E+07 | 1.0 | 13800.0 |
| 3477. | c6h12-1+ho2=c6h1116+h2o2 | 8.40E+12 | 0.0 | 20440.0 | 3535. | c6h1112=c6h1115 | 5.75E+08 | 1.0 | 17300.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|---------------------------------|----------|------|---------|-------|-----------------------------------|----------|------|---------|
| 3702. | hexcy4o2+ho2=>c2h5co+c3h6+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 | 3760. | hex2o2+ch3o2=>hex2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3703. | hexcy3o1+h=>hco+c5h10-1+h2 | 9.60E+08 | 1.5 | 2785.0 | 3761. | hex2o2+hex1o2=>hex2o+hex1o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 3704. | hexcy3o1+h=>nc3h7co+c2h4+h2 | 4.80E+08 | 1.5 | 2005.0 | 3762. | hex2o2+hex2o2=>hex2o+hex2o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 3705. | hexcy3o1+oh=>hco+c5h10-1+h2o | 4.80E+06 | 2.0 | -1192.0 | 3763. | hex2o=c3h+nc4h9cho | 1.78E+13 | 0.0 | 14890.0 |
| 3706. | hexcy3o1+oh=>nc3h7co+c2h4+h2o | 2.40E+06 | 2.0 | -1192.0 | 3764. | hex2o=c3hcho+pc4h9 | 5.25E+13 | 0.0 | 11690.0 |
| 3707. | hexcy3o1+ho2=>hco+c5h10-1+h2o2 | 8.00E+12 | 0.0 | 14400.0 | 3765. | hex3o2+ho2=hex3o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 |
| 3708. | hexcy3o1+ho2=>nc3h7co+c2h4+h2o2 | 4.00E+12 | 0.0 | 13260.0 | 3766. | hex3o2+h2o2=hex3o2h+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |
| 3709. | c6h13-1+ho2=c6h12-1+h2o2 | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | 3767. | hex3o2h=hex3o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 |
| 3710. | c6h13-2+ho2=c6h12-1+h2o2 | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | 3768. | hex3o2+ho2=>hex3o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3711. | c6h13-2+ho2=c6h12-2+h2o2 | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | 3769. | hex3o2+ch3o2=>hex3o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3712. | c6h13-3+ho2=c6h12-2+h2o2 | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | 3770. | hex3o2+hex1o2=>hex3o+hex1o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 3713. | c6h13-3+ho2=c6h12-3+h2o2 | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | 3771. | hex3o2+hex2o2=>hex3o+hex2o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 3714. | c6h12-1+ho2=hex1o2h2j | 2.47E+04 | 2.1 | 12160.0 | 3772. | hex3o2+hex3o2=>hex3o+hex3o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 |
| 3715. | c6h12-1+ho2=hex2o2h1j | 7.74E+03 | 2.3 | 11080.0 | 3773. | hex3o=nprcoet+h | 1.51E+13 | 0.0 | 18070.0 |
| 3716. | c6h12-2+ho2=hex2o2h3j | 7.74E+03 | 2.3 | 11080.0 | 3774. | hex3o=c2h5cho+nc3h7 | 5.25E+13 | 0.0 | 11690.0 |
| 3717. | c6h12-2+ho2=hex3o2h2j | 7.74E+03 | 2.3 | 11080.0 | 3775. | hex3o=c2h5+nc3h7cho | 5.25E+13 | 0.0 | 11690.0 |
| 3718. | c6h12-3+ho2=hex3o2h4j | 1.55E+04 | 2.3 | 11080.0 | 3776. | hex3o+o2=>nprcoet+ho2 | 3.61E+10 | 0.0 | 1090.0 |
| 3719. | hex1o2h2j=>c3h5o+nc3h7+oh | 1.09E+09 | 1.4 | 29500.0 | 3777. | c6h12co+h=c6h13-1+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 |
| 3720. | hex1o2h3j=>c5h10-1+ch2o+oh | 1.23E+09 | 1.3 | 24900.0 | 3778. | c6h12co+oh=c6h13-1+co2 | 3.73E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| 3721. | hex1o2h4j=>c4h8-1+c2h4o2h | 5.08E+11 | 0.7 | 28700.0 | 3779. | c6h12co+o=c6h12-1+co2 | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 |
| 3722. | hex1o2h5j=>c3h6+prooh1-3 | 2.00E+13 | 0.0 | 28700.0 | 3780. | c6h10co+h=c6h1115+co | 4.40E+12 | 0.0 | 1459.0 |
| 3723. | hex2o2h1j=>ch2cho+pc4h9+oh | 4.87E+12 | 0.3 | 29600.0 | 3781. | c6h10co+oh=c6h1115+co2 | 3.73E+12 | 0.0 | -1010.0 |
| 3724. | hex2o2h4j=>c4h8-1+ch3cho+oh | 1.18E+09 | 1.2 | 22700.0 | 3782. | c6h10co+o=c6h1013+co2 | 3.20E+12 | 0.0 | -437.0 |
| 3725. | hex2o2h5j=>c3h6+prooh2-1 | 5.08E+11 | 0.7 | 28700.0 | 3783. | etcoetco=etcoetp+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 3726. | hex3o2h1j=>c2h4+nc3h7cho+oh | 3.53E+09 | 1.2 | 21900.0 | 3784. | prcomeco=>nc3h7coch2+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 3727. | hex4o2h2j=>c3h6+c2h5cho+oh | 1.18E+09 | 1.2 | 22700.0 | 3785. | c4h9cocho+c2o=c4h9coco+ho2 | 2.00E+13 | 0.5 | 42200.0 |
| 3728. | hex4o2h1j=>c2h4+c4h82ooh1j | 5.08E+11 | 0.7 | 28700.0 | 3786. | c4h9cocho+oh=c4h9coco+h2o | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 3729. | hex1o2+c6h13-1=hex1o+hex1o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3787. | c4h9cocho+h=c4h9coco+h2 | 4.00E+13 | 0.0 | 4200.0 |
| 3730. | hex1o2+c6h13-2=hex1o+hex2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3788. | c4h9cocho+o=c4h9coco+oh | 5.00E+12 | 0.0 | 1790.0 |
| 3731. | hex1o2+c6h13-3=hex1o+hex3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3789. | c4h9cocho+ho2=c4h9coco+h2o2 | 2.80E+12 | 0.0 | 13600.0 |
| 3732. | hex2o2+c6h13-1=hex2o+hex1o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3790. | c4h9cocho+ch3=c4h9coco+ch4 | 1.70E+12 | 0.0 | 8440.0 |
| 3733. | hex2o2+c6h13-2=hex2o+hex2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3791. | c4h9cocho+ch3o=c4h9coco+ch3oh | 1.15E+11 | 0.0 | 1280.0 |
| 3734. | hex2o2+c6h13-3=hex2o+hex3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3792. | c4h9cocho+ch3o2=c4h9coco+ch3o2h | 1.00E+12 | 0.0 | 9500.0 |
| 3735. | hex3o2+c6h13-1=hex3o+hex1o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3793. | c4h9coco=nc4h9co+co | 1.83E+15 | -0.7 | 12910.0 |
| 3736. | hex3o2+c6h13-2=hex3o+hex2o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3794. | etcoetp+o2=etcoeto2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3737. | hex3o2+c6h13-3=hex3o+hex3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3795. | etcoeto2+ho2=pent1o2h3*o+o2 | 2.11E+10 | 0.0 | -3640.0 |
| 3738. | c6h13-1+ho2=hex1o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3796. | etcoeto2+h2o2=pent1o2h3*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |
| 3739. | c6h13-2+ho2=hex2o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3797. | etcoeto2+ho2=>etcoeto+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3740. | c6h13-3+ho2=hex3o+oh | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3798. | etcoeto2+ch3o2=>etcoeto+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3741. | hex1o2+ch3=hex1o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3799. | etcoeto=ch2o+c2h5coch2 | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 3742. | hex2o2+ch3=hex2o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3800. | etcoeto+o2=c5ald3oxo+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 220.0 |
| 3743. | hex3o2+ch3=hex3o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3801. | nc3h7coch2+o2=prcoch2o2 | 9.00E+18 | -2.5 | 0.0 |
| 3744. | c6h13-1+ch3o2=hex1o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3802. | prcoch2o2+ho2=pent1o2h2*o+o2 | 2.11E+10 | 0.0 | -3640.0 |
| 3745. | c6h13-2+ch3o2=hex2o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3803. | prcoch2o2+h2o2=pent1o2h2*o+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 |
| 3746. | c6h13-3+ch3o2=hex3o+ch3o | 7.00E+12 | 0.0 | -1000.0 | 3804. | prcoch2o2+ho2=>prcoch2o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3747. | hex1o2+ho2=hex1o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 | 3805. | prcoch2o2+ch3o2=>prcoch2o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 |
| 3748. | hex1o2+h2o2=hex1o2h+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 | 3806. | prcoch2o=ch2o+nc3h7co | 2.00E+13 | 0.0 | 20000.0 |
| 3749. | hex1o2h=hex1o+oh | 1.50E+16 | 0.0 | 42500.0 | 3807. | prcoch2o+o2=c5ald2oxo+ho2 | 8.43E+09 | 0.0 | 220.0 |
| 3750. | hex1o2+ho2=>hex1o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | 3808. | c6h1015=c3h5-a+c3h5-a | 3.16E+35 | -6.0 | 67620.0 |
| 3751. | hex1o2+ch3o2=>hex1o+ch3o+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | 3809. | c6h1015=c2h3+c4h714 | 2.00E+19 | -1.0 | 96770.0 |
| 3752. | hex1o2+hex1o2=>hex1o+hex1o+o2 | 2.41E+10 | 0.0 | 0.0 | 3810. | c6h1015+h=c3h5-a+c3h6 | 4.31E+23 | -2.7 | 9830.2 |
| 3753. | hex1o=c5h11cho+h | 1.70E+13 | 0.0 | 20510.0 | 3811. | c6h1015+h=c2h4+c4h714 | 3.25E+22 | -2.5 | 11048.4 |
| 3754. | hex1o=ch2o+c5h11-1 | 9.12E+13 | 0.0 | 14360.0 | 3812. | c6h1015+h=c3h4-a+c3h5-a+h2 | 1.00E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 3755. | hex1o+o2=>c5h11cho+ho2 | 3.61E+10 | 0.0 | 1090.0 | 3813. | c6h1015+h=c6h9153+h2 | 1.08E+05 | 2.5 | -1900.0 |
| 3756. | hex2o2+ho2=hex2o2h+o2 | 2.29E+11 | 0.0 | -1790.0 | 3814. | c6h1015+oh=c6h9153+h2o | 6.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 3757. | hex2o2+h2o2=hex2o2h+ho2 | 2.41E+12 | 0.0 | 9936.0 | 3815. | c6h1015+ho2=c6h9153+h2o2 | 1.28E+04 | 2.6 | 12400.0 |
| 3758. | hex2o2h=hex2o+oh | 9.45E+15 | 0.0 | 41600.0 | 3816. | c6h1015+ch3=c6h9153+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 3759. | hex2o2+ho2=>hex2o+oh+o2 | 1.40E+16 | -1.6 | 1860.0 | 3817. | c6h1015+c2h3=c6h9153+c2h4 | 3.22E+13 | 0.0 | 7361.2 |

| | | | | | | | | | |
|-------|--------------------------------|----------|-------|----------|-------|--------------------------------|----------|-------|---------|
| 3818. | c6h1015+c3h5-a=c6h9153+c3h6 | 7.24E+00 | 3.6 | 13300.0 | 3870. | pentloh+o=pentloh-4+oh | 3.90E+13 | 0.0 | 5200.0 |
| 3819. | c6h9153=>c4h6+c2h3 | 1.71E+15 | 0.0 | 45100.0 | 3871. | pentloh+o=pentloh-5+oh | 5.10E+13 | 0.0 | 7850.0 |
| 3820. | c4h6+c2h3=>c6h9153 | 1.38E+13 | 0.0 | 2300.0 | 3872. | pentloh+oh=pentloh-1+h2o | 4.56E+03 | 2.8 | -3686.0 |
| 3821. | c6h9153=c6h8135+h | 3.20E+13 | 0.0 | 40700.0 | 3873. | pentloh+oh=pentloh+h2o | 7.90E+06 | 1.6 | -461.0 |
| 3822. | c6h9153+o2=c6h8135+ho2 | 1.60E+12 | 0.0 | 15160.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 3823. | c6h9153+ho2=c3h5-a+c2h3cho+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 | 3874. | pentloh+oh=pentloh+h2o | 1.60E+03 | 2.9 | 53.0 |
| 3824. | c6h9153=>c6h9143 | 1.84E+12 | 0.0 | 31300.0 | | Declared duplicate reaction... | | | |
| 3825. | c6h9143=>c6h9153 | 1.32E+13 | 0.0 | 44800.0 | 3875. | pentloh+oh=pentloh-2+h2o | 3.91E+03 | 2.8 | -2061.2 |
| 3826. | mcps2ds1=>c6h9143 | 5.30E+13 | 0.0 | 43200.0 | 3876. | pentloh+oh=pentloh-3+h2o | 7.05E+09 | 0.9 | 504.7 |
| 3827. | c6h9143=>mcps2ds1 | 2.45E+12 | 0.0 | 36600.0 | 3877. | pentloh+oh=pentloh-4+h2o | 7.05E+09 | 0.9 | 504.7 |
| 3828. | cc6h914=>cc6h813+h | 8.94E+13 | 0.0 | 34600.0 | 3878. | pentloh+oh=pentloh-5+h2o | 1.37E+07 | 1.8 | 868.3 |
| 3829. | cc6h813+h=>cc6h914 | 1.32E+14 | 0.0 | 3300.0 | 3879. | pentloh+ho2=pentloh+h2o2 | 6.47E-07 | 5.3 | 10533.0 |
| 3830. | cc6h813=c6h8135 | 5.01E+16 | 0.0 | 88230.0 | 3880. | pentloh+ho2=pentloh-1+h2o2 | 2.80E-05 | 5.3 | 8268.0 |
| 3831. | cc6h813=c6h6+h2 | 2.50E+13 | 0.0 | 59000.0 | 3881. | pentloh+ho2=pentloh-2+h2o2 | 1.50E-02 | 4.5 | 14706.0 |
| 3832. | cc6h813+h=c6h7c+h2 | 1.08E+05 | 2.5 | -1900.0 | 3882. | pentloh+ho2=pentloh-3+h2o2 | 1.50E-02 | 4.3 | 13076.0 |
| 3833. | cc6h813+oh=c6h7c+h2o | 6.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 3883. | pentloh+ho2=pentloh-4+h2o2 | 6.10E-01 | 3.7 | 13627.0 |
| 3834. | cc6h813+ch3=c6h7c+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 7300.0 | 3884. | pentloh+ho2=pentloh-5+h2o2 | 1.76E+02 | 3.2 | 17197.0 |
| 3835. | c6h8135+h=c6h7135-1+h2 | 1.64E+06 | 2.5 | 12280.0 | 3885. | pentloh+ch3=pentloh+ch4 | 1.02E+00 | 3.6 | 8221.0 |
| 3836. | c6h8135+oh=c6h7135-1+h2o | 4.40E+06 | 2.0 | 2780.0 | 3886. | pentloh+ch3=pentloh-1+ch4 | 2.20E+02 | 3.1 | 7600.0 |
| 3837. | c6h8135+ch3=c6h7135-1+ch4 | 2.72E+00 | 3.5 | 12900.0 | 3887. | pentloh+ch3=pentloh-2+ch4 | 9.20E+02 | 2.9 | 8790.0 |
| 3838. | c4h713+c3h5-a=c7h12 | 1.00E+15 | -0.8 | 0.0 | 3888. | pentloh+ch3=pentloh-3+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 3839. | pentloh=c5h10-1+h2o | 3.20E+04 | 2.6 | 63130.0 | 3889. | pentloh+ch3=pentloh-4+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 9600.0 |
| 3840. | ch3+pc4h8oh-4=pentloh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3890. | pentloh+ch3=pentloh-5+ch4 | 3.00E-01 | 4.0 | 8200.0 |
| 3841. | c2h5+proloh-3=pentloh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3891. | pentloh-5=pentloh-4 | 3.79E+47 | -12.4 | 26450.0 |
| 3842. | nc3h7+pc2h4oh=pentloh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3892. | pentloh-5=pentloh-3 | 1.23E+08 | -0.4 | 17510.0 |
| 3843. | pc4h9+ch2oh=pentloh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3893. | pentloh-5=pentloh-2 | 2.95E+31 | -6.7 | 28450.0 |
| 3844. | pentloh=oh+c5h11-1 | 4.65E+63 | -15.0 | 109623.0 | 3894. | pentloh-5=pentloh-1 | 9.52E+17 | -2.7 | 15610.0 |
| 3845. | pentloh+h=pentloh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3895. | pentloh-5=pentloh | 8.79E+06 | 0.0 | 8796.0 |
| 3846. | pentloh-1+h=pentloh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3896. | pentloh-4=pentloh-3 | 5.41E+44 | -11.2 | 30480.0 |
| 3847. | pentloh-2+h=pentloh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3897. | pentloh-4=pentloh-2 | 1.26E+38 | -9.1 | 35320.0 |
| 3848. | pentloh-3+h=pentloh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3898. | pentloh-4=pentloh-1 | 8.13E+32 | -7.0 | 26240.0 |
| 3849. | pentloh-4+h=pentloh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3899. | pentloh-4=pentloh | 1.42E+09 | 0.0 | 9106.0 |
| 3850. | pentloh-5+h=pentloh | 4.00E+13 | 0.0 | 0.0 | 3900. | pentloh-3=pentloh-2 | 1.21E+62 | -15.8 | 53940.0 |
| 3851. | pentloh+o2=pentloh+ho2 | 1.00E+13 | 0.0 | 56340.0 | 3901. | pentloh-3=pentloh-1 | 2.05E+35 | -8.0 | 38670.0 |
| 3852. | pentloh+o2=pentloh-1+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 46800.0 | 3902. | pentloh-3=pentloh | 1.88E+07 | 0.0 | 16680.0 |
| 3853. | pentloh+o2=pentloh-2+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 49800.0 | 3903. | pentloh-2=pentloh-1 | 1.54E+53 | -13.3 | 44990.0 |
| 3854. | pentloh+o2=pentloh-3+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 49800.0 | 3904. | pentloh-2=pentloh | 8.17E+06 | 0.0 | 23290.0 |
| 3855. | pentloh+o2=pentloh-4+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 49800.0 | 3905. | pentloh-1=pentloh | 3.40E+08 | 0.0 | 22970.0 |
| 3856. | pentloh+o2=pentloh-5+ho2 | 3.00E+13 | 0.0 | 52340.0 | 3906. | pentloh+o2=nc4h9cho+ho2 | 4.28E+10 | 0.0 | 1100.0 |
| 3857. | pentloh+h=pentloh+h2 | 9.46E+02 | 3.1 | 8701.0 | 3907. | pentloh-1+o2=nc4h9cho+ho2 | 1.50E+18 | -1.8 | 1120.0 |
| 3858. | pentloh+h=pentloh-1+h2 | 8.79E+04 | 2.7 | 2915.0 | 3908. | pentloh-1+o2=pent1enlol+h2o | 8.90E+03 | 2.1 | 470.0 |
| 3859. | pentloh+h=pentloh-2+h2 | 1.08E+05 | 2.7 | 4440.0 | 3909. | pentloh-2+o2=pent1enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3860. | pentloh+h=pentloh-3+h2 | 3.06E+04 | 2.8 | 3473.3 | 3910. | pentloh-2+o2=pent2enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 3911. | pentloh-3+o2=pent2enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3861. | pentloh+h=pentloh-3+h2 | 5.73E+13 | 0.1 | 10568.9 | 3912. | pentloh-3+o2=pent3enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 3913. | pentloh-4+o2=pent3enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3862. | pentloh+h=pentloh-4+h2 | 3.06E+04 | 2.8 | 3473.3 | 3914. | pentloh-4+o2=pent4enlol+h2o | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 3915. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3863. | pentloh+h=pentloh-4+h2 | 5.73E+13 | 0.1 | 10568.9 | 3916. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 3917. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3864. | pentloh+h=pentloh-5+h2 | 3.67E+03 | 3.1 | 5343.0 | 3918. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 3919. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3865. | pentloh+h=pentloh-5+h2 | 1.63E+14 | 0.0 | 13674.5 | 3920. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| | Declared duplicate reaction... | | | | 3921. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3866. | pentloh+o=pentloh+oh | 1.46E-03 | 4.7 | 1727.0 | 3922. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3867. | pentloh+o=pentloh-1+oh | 1.45E+05 | 2.5 | 876.0 | 3923. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3868. | pentloh+o=pentloh-2+oh | 1.44E+05 | 2.6 | 3029.0 | 3924. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 3869. | pentloh+o=pentloh-3+oh | 3.90E+13 | 0.0 | 5200.0 | 3925. | pentloh-5+o2=pent4enlol+h2o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|---------------------------------|----------|-------|---------|-------|------------------------------------|----------|------|---------|
| 4114. | pent2oh-3=pent2oh-1 | 1.78E+10 | -0.3 | 30960.0 | 4172. | pent3en2ol+ch3=pent2oh3d-5+ch4 | 2.22E+00 | 3.5 | 5670.0 |
| 4115. | pent2oh-3=pent2oh-4 | 1.36E+18 | -2.7 | 33373.7 | 4173. | pent4en2ol+h=pent2oh3d-5+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4116. | pent2oh-3=pent2oh-5 | 9.13E+06 | 0.5 | 29020.6 | 4174. | pent4en2ol+oh=pent2oh3d-5+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4117. | pent2oh-3=pent2o | 8.17E+06 | 0.0 | 23290.0 | 4175. | pent4en2ol+ho2=pent2oh3d-5+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4118. | pent2oh-4=pent2oh-1 | 2.82E+13 | -1.2 | 21665.5 | 4176. | pent4en2ol+ch3=pent2oh3d-5+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4119. | pent2oh-4=pent2oh-5 | 3.00E+20 | -3.3 | 32687.7 | 4177. | c4h71d1oh+h=c4h61d1oh3+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4120. | pent2oh-4=pent2o | 1.88E+07 | 0.0 | 16680.0 | 4178. | c4h71d1oh+oh=c4h61d1oh3+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4121. | pent2oh-5=pent2oh-1 | 1.82E+13 | -1.1 | 12646.3 | 4179. | c4h71d1oh+ho2=c4h61d1oh3+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4122. | pent2oh-5=pent2o | 1.42E+09 | 0.0 | 9106.0 | 4180. | c4h71d1oh+ch3=c4h61d1oh3+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4123. | pent2o+o2=nc3h7coch3+ho2 | 2.14E+10 | 0.0 | 1100.0 | 4181. | c4h73d2oh+h=c4h63d2oh2+h2 | 2.50E+04 | 2.5 | -2790.0 |
| 4124. | pent2oh-2+o2=nc3h7coch3+ho2 | 1.50E+18 | -1.8 | 1120.0 | 4182. | c4h73d2oh+oh=c4h63d2oh2+h2o | 1.30E+06 | 2.0 | -2620.0 |
| 4125. | pent2oh-1+o2=pent1en2ol+ho2 | 4.50E+11 | 0.0 | 5000.0 | 4183. | c4h73d2oh+ho2=c4h63d2oh2+h2o2 | 1.60E+04 | 2.6 | 10900.0 |
| 4126. | pent2oh-2+o2=pent1en2ol+ho2 | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 | 4184. | c4h73d2oh+ch3=c4h63d2oh2+ch4 | 5.00E+10 | 0.0 | 5600.0 |
| 4127. | pent2oh-2+o2=pent2en2ol+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 4185. | c4h71d1oh=>nc3h7cho | 9.66E+23 | -3.3 | 59987.5 |
| 4128. | pent2oh-3+o2=pent2en2ol+ho2 | 4.50E+11 | 0.0 | 5000.0 | 4186. | pent1en2ol=>nc3h7coch3 | 9.66E+23 | -3.3 | 59987.5 |
| 4129. | pent2oh-3+o2=pent3en2ol+ho2 | 7.90E+11 | 0.0 | 5000.0 | 4187. | pent2en2ol=>nc3h7coch3 | 9.66E+23 | -3.3 | 59987.5 |
| 4130. | pent2oh-4+o2=pent3en2ol+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 4188. | pent2oh1d-3+ho2=c2h5cho+c2h2oh+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4131. | pent2oh-4+o2=pent4en2ol+ho2 | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 | 4189. | pent2oh2d-4+ho2=c3cho+c3h4-p+oh+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4132. | pent2oh-5+o2=pent4en2ol+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 4190. | pent2oh3d-5+ho2=c2h3cho+ch3choh+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4133. | pent2o=nc3h7cho+ch3 | 2.67E+11 | 0.0 | 10820.0 | 4191. | c4h61d1oh3+ho2=ch3cho+c2h2oh+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4134. | pent2o=ch3cho+nc3h7 | 2.67E+11 | 0.0 | 10820.0 | 4192. | c4h63d2oh2+o2=c2h3coch3+ho2 | 1.50E+11 | 0.0 | 15200.0 |
| 4135. | pent2oh-1=c5h10-1+oh | 4.70E+27 | -4.6 | 32703.1 | 4193. | c4h63d2oh2=c2h3coch3+h | 1.89E+06 | 2.1 | 28289.0 |
| 4136. | pent2oh-1=nc3h7+c2h3oh | 7.24E+28 | -4.9 | 35257.5 | 4194. | pent2oh3d-5=c5h813+oh | 7.40E+12 | 0.0 | 27350.0 |
| 4137. | pent2oh-1=pent1en2ol+h | 6.30E+45 | -10.4 | 46160.0 | 4195. | pent2oh3d-5=ac3h5cho+ch3 | 7.40E+12 | 0.0 | 24350.0 |
| 4138. | pent2oh-2=nc3h7coch3+h | 7.68E+26 | -4.5 | 34620.4 | 4196. | pent4en2ol+oh=sc4h8oh-4+ch2o | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4139. | pent2oh-2=c2h5+pro2oh1d | 4.65E+29 | -5.1 | 34449.8 | 4197. | pent2en2ol+oh=c2h5cho+ch3choh | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4140. | pent2oh-2=pent1en2ol+h | 1.07E+59 | -14.4 | 51810.0 | 4198. | pent3en2ol+oh=ch3cho+pro2oh-1 | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4141. | pent2oh-2=pent2en2ol+h | 1.04E+44 | -9.7 | 47660.0 | 4199. | pent1en2ol+oh=ch2o+pc4h8oh-1 | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4142. | pent2oh-3=t2c5h10+oh | 3.91E+24 | -3.9 | 30587.5 | 4200. | c4h71d1oh+oh=c2h5cho+ch2oh | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4143. | pent2oh-3=c2c5h10+oh | 3.91E+24 | -3.9 | 31387.5 | 4201. | c4h73d2oh+oh=pro2oh-1+ch2o | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4144. | pent2oh-3=c4h71d1oh+ch3 | 5.14E+27 | -4.7 | 36714.5 | 4202. | c4h73d2oh+oh=ch3cho+ch3choh | 1.37E+12 | 0.0 | -1040.0 |
| 4145. | pent2oh-3=c4h73d2oh+ch3 | 5.79E+26 | -4.3 | 35370.3 | 4203. | c4h71d1oh+h=c2h3oh+c2h5 | 4.31E+22 | -2.7 | 9830.2 |
| 4146. | pent2oh-3=pent2en2ol+h | 6.30E+45 | -10.4 | 46160.0 | 4204. | c4h73d2oh+h=ch3choh+c2h4 | 4.31E+22 | -2.7 | 9830.2 |
| 4147. | pent2oh-3=pent3en2ol+h | 1.74E+52 | -12.4 | 50630.0 | 4205. | c4h73d2oh+h=t2c4h8+oh | 4.31E+22 | -2.7 | 9830.2 |
| 4148. | pent2oh-4=c3h6+ch3choh | 1.65E+29 | -5.0 | 33140.8 | 4206. | c4h73d2oh+h=c2c4h8+oh | 4.31E+22 | -2.7 | 9830.2 |
| 4149. | pent2oh-4=pent3en2ol+h | 1.19E+57 | -14.0 | 49340.0 | 4207. | nc3h7coch3+h<=>nc3h7+ch3cho | 3.55E+12 | -0.1 | 7920.7 |
| 4150. | pent2oh-4=pent4en2ol+h | 1.07E+59 | -14.4 | 51810.0 | 4208. | nc3h7coch3+h<=>nc3h7cho+ch3 | 9.98E+10 | 0.3 | 9474.7 |
| 4151. | pent2oh-5=c2h4+pro2oh-1 | 3.95E+28 | -4.8 | 34441.1 | 4209. | nc3h7coch3+oh=prcoch3-1+h2o | 1.37E+07 | 1.8 | 868.3 |
| 4152. | pent2oh-5=pent4en2ol+h | 2.95E+46 | -10.4 | 48780.0 | 4210. | nc3h7coch3+oh=prcoch3-2+h2o | 7.05E+09 | 0.9 | 504.7 |
| 4153. | pent1en2ol+h=pent2oh1d-3+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 | 4211. | nc3h7coch3+oh=prcoch3-3+h2o | 2.36E+02 | 3.1 | -3050.0 |
| 4154. | pent1en2ol+oh=pent2oh1d-3+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 4212. | nc3h7coch3+oh=nc3h7coch2+h2o | 3.99E+02 | 3.1 | -944.0 |
| 4155. | pent1en2ol+ho2=pent2oh1d-3+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 | 4213. | nc3h7coch3+h=prcoch3-1+h2 | 6.66E+05 | 2.5 | 6756.0 |
| 4156. | pent1en2ol+ch3=pent2oh1d-3+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 | 4214. | nc3h7coch3+h=prcoch3-2+h2 | 1.30E+06 | 2.4 | 4471.0 |
| 4157. | pent2en2ol+h=pent2oh1d-3+h2 | 1.74E+04 | 2.5 | 2510.0 | 4215. | nc3h7coch3+h=prcoch3-3+h2 | 1.99E+06 | 2.3 | 4083.8 |
| 4158. | pent2en2ol+oh=pent2oh1d-3+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -298.0 | 4216. | nc3h7coch3+h=nc3h7coch2+h2 | 1.20E+07 | 2.2 | 6937.8 |
| 4159. | pent2en2ol+ho2=pent2oh1d-3+h2o2 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 | 4217. | nc3h7coch3+ch3=prcoch3-1+ch4 | 1.53E+00 | 3.6 | 7154.0 |
| 4160. | pent2en2ol+ch3=pent2oh1d-3+ch4 | 2.22E+00 | 3.5 | 5670.0 | 4218. | nc3h7coch3+ch3=prcoch3-2+ch4 | 2.27E+00 | 3.5 | 5481.0 |
| 4161. | pent2en2ol+h=pent2oh2d-4+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 | 4219. | nc3h7coch3+ch3=prcoch3-3+ch4 | 2.00E+00 | 3.4 | 6858.1 |
| 4162. | pent2en2ol+oh=pent2oh2d-4+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 | 4220. | nc3h7coch3+ch3=nc3h7coch2+ch4 | 2.04E+01 | 3.4 | 9356.1 |
| 4163. | pent2en2ol+ho2=pent2oh2d-4+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 | 4221. | nc3h7coch3+ho2=prcoch3-1+h2o2 | 2.04E+01 | 3.6 | 17161.0 |
| 4164. | pent2en2ol+ch3=pent2oh2d-4+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 | 4222. | nc3h7coch3+ho2=prcoch3-2+h2o2 | 6.32E+01 | 3.4 | 13719.0 |
| 4165. | pent3en2ol+h=pent2oh2d-4+h2 | 2.50E+04 | 2.5 | -2790.0 | 4223. | nc3h7coch3+ho2=prcoch3-3+h2o2 | 3.56E-01 | 3.7 | 13098.0 |
| 4166. | pent3en2ol+oh=pent2oh2d-4+h2o | 1.30E+06 | 2.0 | -2620.0 | 4224. | nc3h7coch3+ho2=nc3h7coch2+h2o2 | 4.14E-02 | 4.1 | 16252.0 |
| 4167. | pent3en2ol+ho2=pent2oh2d-4+h2o2 | 1.60E+04 | 2.6 | 10900.0 | 4225. | nc3h7coch3+ch3o2=prcoch3-1+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 19380.0 |
| 4168. | pent3en2ol+ch3=pent2oh2d-4+ch4 | 5.00E+10 | 0.0 | 5600.0 | 4226. | nc3h7coch3+ch3o2=prcoch3-2+ch3o2h | 1.99E+12 | 0.0 | 17050.0 |
| 4169. | pent3en2ol+h=pent2oh3d-5+h2 | 1.74E+04 | 2.5 | 2510.0 | 4227. | nc3h7coch3+ch3o2=prcoch3-3+ch3o2h | 2.00E+12 | 0.0 | 15250.0 |
| 4170. | pent3en2ol+oh=pent2oh3d-5+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -298.0 | 4228. | nc3h7coch3+ch3o2=nc3h7coch2+ch3o2h | 3.01E+12 | 0.0 | 17580.0 |
| 4171. | pent3en2ol+ho2=pent2oh3d-5+h2o2 | 9.60E+03 | 2.6 | 13900.0 | 4229. | prcoch3-2=c3h6+ch3co | 2.72E+16 | -1.1 | 25590.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|---|----------|-------|---------|-------|------------------------------|----------|------|---------|
| 4385. | but2m2o=c2h5coch3+ch3 | 2.67E+13 | 0.3 | 13367.7 | 4439. | cyc5h8oh-1=cyc5h8oh-3 | 1.04E+04 | 2.5 | 42187.0 |
| 4386. | but2m2o=ch3coch3+c2h5 | 3.97E+13 | 0.1 | 10625.5 | 4440. | cyc5h8oh-2=cyc5h8oh-3 | 3.37E+05 | 2.3 | 34905.0 |
| 4387. | but2m2oh-3+o2=but2m2oh3d+ho2 | 6.90E+11 | 0.0 | 5000.0 | 4441. | cyc5h9o=cyc5h8o+h | 3.96E+09 | 1.1 | 18934.0 |
| 4388. | but2m2oh-4+o2=but2m2oh3d+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 | 4442. | cyc5h9o=c4h8cho-5 | 8.20E+12 | 0.2 | 9380.0 |
| 4389. | but2m2oh-3+o2=but2m2oh3o2 | 2.00E+12 | 0.0 | 0.0 | 4443. | cyc5h8oh-1=cyc5h8o+h | 6.17E+08 | 1.4 | 29772.0 |
| 4390. | but2m2oh3o2=>ch3coch3+ch3cho+oh | 2.50E+10 | 0.0 | 18860.0 | 4444. | cyc5h8oh-1=cyptn1oh+h | 2.19E+09 | 1.4 | 35196.0 |
| 4391. | but2m2oh-1=but2m2oh-3 | 2.00E+01 | 1.3 | 21168.4 | 4445. | cyc5h8oh-1=nc3h7coch2 | 7.03E+10 | 0.9 | 34006.0 |
| 4392. | Declared duplicate reaction... but2m2oh-1=but2m2oh-3 | 3.86E+44 | -10.3 | 46516.4 | 4446. | cyc5h8oh-2=cyc5h8+oh | 2.44E+12 | 0.4 | 27027.0 |
| 4393. | Declared duplicate reaction... but2m2oh-4=but2m2oh-3 | 3.57E+44 | -10.3 | 47092.6 | 4447. | cyc5h8oh-2=pent1oh1d-5 | 7.31E+10 | 0.8 | 33427.0 |
| 4394. | Declared duplicate reaction... but2m2oh-4=but2m2oh-3 | 4.51E-01 | 2.2 | 23372.2 | 4448. | cyc5h8oh-2=pent3oh1d-5 | 2.18E+12 | 0.4 | 36670.0 |
| 4395. | but2m2oh-1=but2m2oh-4 | 7.29E+11 | -0.5 | 20439.2 | 4449. | cyc5h8oh-2=cyptn1oh+h | 1.25E+09 | 1.2 | 33438.0 |
| 4396. | but2m2oh3d+o=bt2m2oh3d1+oh | 1.96E+06 | 2.4 | 4750.0 | 4450. | cyc5h8oh-2=cyptn2oh+h | 2.47E+10 | 1.1 | 36590.0 |
| 4397. | but2m2oh3d+h=bt2m2oh3d1+h2 | 1.33E+06 | 2.5 | 6756.0 | 4451. | cyc5h8oh-3=pent1oh4d-1 | 4.05E+11 | 0.6 | 33723.0 |
| 4398. | but2m2oh3d+oh=bt2m2oh3d1+h2o | 4.62E+00 | 3.7 | -2946.0 | 4452. | cyc5h8oh-3=pent2oh4d-1 | 8.94E+11 | 0.5 | 36571.0 |
| 4399. | but2m2oh3d+ho2=bt2m2oh3d1+h2o2 | 2.26E-02 | 4.5 | 13850.0 | 4453. | cyc5h8oh-3=cyptn2oh+h | 1.17E+10 | 1.1 | 36797.0 |
| 4400. | but2m2oh3d+ch3=bt2m2oh3d1+ch4 | 9.06E-01 | 3.6 | 7154.0 | 4454. | cyc5h8oh-3=cyptn3oh+h | 3.71E+10 | 1.0 | 37246.0 |
| 4401. | isope+oh=>bt2m2oh3d1 | 5.78E+11 | 0.0 | 5705.3 | 4455. | pent1oh1d-5=c2h4+ch2chchoh | 3.30E+13 | 0.0 | 22500.0 |
| 4402. | isope+oh=>bt3m2oh3d1 | 1.09E+12 | 0.0 | 3114.0 | 4456. | pent1oh4d-1=c3h5-a+c2h3oh | 3.30E+13 | 0.0 | 22500.0 |
| 4403. | isope+oh=>bt2m1oh3d2 | 1.74E+06 | 2.0 | -741.0 | 4457. | pent2oh4d-1=c3h5-a+c2h3oh | 3.30E+13 | 0.0 | 22500.0 |
| 4404. | isope+oh=>bt3m1oh3d2 | 1.30E+02 | 3.0 | 23600.0 | 4458. | pent2oh4d-1=c5h814+oh | 2.44E+12 | 0.4 | 27027.0 |
| 4405. | but2oh1d=c2h5coch3 | 9.66E+23 | -3.3 | 59987.5 | 4459. | cyc5h9o+o2=cyc5h8o+ho2 | 2.14E+10 | 0.0 | 1100.0 |
| 4406. | but2oh2d=c2h5coch3 | 9.66E+23 | -3.3 | 49987.5 | 4460. | cyc5h8oh-1+o2=cyc5h8o+ho2 | 1.54E+18 | -1.8 | 1120.0 |
| 4407. | cyptentoh=cyc5h8+h2o | 6.40E+04 | 2.6 | 62500.0 | 4461. | cyc5h8oh-1+o2=cyptn1oh+ho2 | 1.78E+04 | 2.1 | 470.0 |
| 4408. | cyc5h9+oh=cyptentoh | 2.41E+13 | 0.0 | 0.0 | 4462. | cyc5h8oh-2+o2=cyptn1oh+ho2 | 4.50E+11 | 0.0 | 4000.0 |
| 4409. | cyc5h8oh-1+h=cyptentoh | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | 4463. | cyc5h8oh-2+o2=cyptn2oh+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4410. | cyc5h8oh-2+h=cyptentoh | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | 4464. | cyc5h8oh-3+o2=cyptn2oh+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4411. | cyc5h8oh-3+h=cyptentoh | 1.00E+14 | 0.0 | 0.0 | 4465. | cyc5h8oh-3+o2=cyptn3oh+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4412. | cyptentoh+o2=cyc5h8oh-1+ho2 | 1.00E+13 | 0.0 | 46800.0 | 4466. | pent3oh1d-5=c2h4+ch2chchoh | 4.24E+10 | 0.8 | 29211.0 |
| 4413. | cyptentoh+o2=cyc5h8oh-2+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 49800.0 | 4467. | cyptn2oh=cpd+h2o | 1.67E+08 | 1.2 | 60311.0 |
| 4414. | cyptentoh+o2=cyc5h8oh-3+ho2 | 2.00E+13 | 0.0 | 49800.0 | 4468. | cyc5h7+oh=cyptn2oh | 1.00E+13 | 0.0 | 0.0 |
| 4415. | cyptentoh+h=cyc5h9o+h2 | 9.46E+02 | 3.1 | 8701.0 | 4469. | cyptn1oh+h=cyptn1oh-1+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4416. | cyptentoh+h=cyc5h8oh-1+h2 | 2.40E+07 | 1.9 | 2460.0 | 4470. | cyptn1oh+o=cyptn1oh-1+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4417. | cyptentoh+h=cyc5h8oh-2+h2 | 2.16E+05 | 2.7 | 4440.0 | 4471. | cyptn1oh+oh=cyptn1oh-1+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4418. | cyptentoh+h=cyc5h8oh-3+h2 | 9.52E+04 | 2.6 | 3130.1 | 4472. | cyptn1oh+ho2=cyptn1oh-1+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4419. | cyptentoh+o=cyc5h9o+oh | 1.46E-03 | 4.7 | 1727.0 | 4473. | cyptn1oh+ch3=cyptn1oh-1+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4420. | cyptentoh+o=cyc5h8oh-1+oh | 1.45E+05 | 2.4 | 876.0 | 4474. | cyptn1oh+h=cyptn1oh-2+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4421. | cyptentoh+o=cyc5h8oh-2+oh | 2.90E+05 | 2.4 | 876.0 | 4475. | cyptn1oh+o=cyptn1oh-2+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4422. | cyptentoh+o=cyc5h8oh-3+oh | 9.54E+04 | 2.7 | 2106.0 | 4476. | cyptn1oh+oh=cyptn1oh-2+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4423. | cyptentoh+oh=cyc5h9o+h2o | 2.77E+06 | 1.6 | -32.5 | 4477. | cyptn1oh+ho2=cyptn1oh-2+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4424. | cyptentoh+oh=cyc5h8oh-1+h2o | 3.20E+05 | 2.2 | -1573.5 | 4478. | cyptn1oh+ch3=cyptn1oh-2+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4425. | cyptentoh+oh=cyc5h8oh-2+h2o | 6.70E+03 | 2.8 | -2108.7 | 4479. | cyptn2oh+h=cyptn1oh-2+h2 | 2.50E+04 | 2.5 | -2790.0 |
| 4426. | cyptentoh+oh=cyc5h8oh-3+h2o | 9.14E+04 | 2.6 | -940.0 | 4480. | cyptn2oh+o=cyptn1oh-2+oh | 3.40E+10 | 0.7 | 1330.0 |
| 4427. | cyptentoh+ho2=cyc5h9o+h2o2 | 1.70E-01 | 3.9 | 17473.1 | 4481. | cyptn2oh+oh=cyptn1oh-2+h2o | 1.30E+06 | 2.0 | -2620.0 |
| 4428. | cyptentoh+ho2=cyc5h8oh-1+h2o2 | 2.31E-01 | 3.7 | 7719.7 | 4482. | cyptn2oh+ho2=cyptn1oh-2+h2o2 | 1.60E+04 | 2.6 | 10900.0 |
| 4429. | cyptentoh+ho2=cyc5h8oh-2+h2o2 | 1.76E-03 | 4.5 | 11261.9 | 4483. | cyptn2oh+ch3=cyptn1oh-2+ch4 | 5.00E+10 | 0.0 | 5600.0 |
| 4430. | cyptentoh+ho2=cyc5h8oh-3+h2o2 | 3.88E+04 | 2.5 | 14170.0 | 4484. | cyptn2oh+h=cyptn2oh-1+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4431. | cyptentoh+ch3=cyc5h9o+ch4 | 2.04E+00 | 3.6 | 7722.0 | 4485. | cyptn2oh+o=cyptn2oh-1+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4432. | cyptentoh+ch3=cyc5h8oh-1+ch4 | 6.60E+02 | 2.9 | 5730.0 | 4486. | cyptn2oh+oh=cyptn2oh-1+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4433. | cyptentoh+ch3=cyc5h8oh-2+ch4 | 1.84E+03 | 2.9 | 8790.0 | 4487. | cyptn2oh+ho2=cyptn2oh-1+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4434. | cyptentoh+ch3=cyc5h8oh-3+ch4 | 2.03E+00 | 3.7 | 6913.4 | 4488. | cyptn2oh+ch3=cyptn2oh-1+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4435. | cyc5h9o=cyc5h8oh-1 | 3.07E+07 | 1.6 | 22412.0 | 4489. | cyptn3oh+h=cyptn2oh-1+h2 | 1.08E+05 | 2.5 | -1900.0 |
| 4436. | cyc5h9o=cyc5h8oh-2 | 3.85E+04 | 2.3 | 18495.0 | 4490. | cyptn3oh+o=cyptn2oh-1+oh | 1.76E+11 | 0.7 | 3250.0 |
| 4437. | cyc5h9o=cyc5h8oh-3 | 2.29E+06 | 1.6 | 16762.0 | 4491. | cyptn3oh+oh=cyptn2oh-1+h2o | 6.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4438. | cyc5h8oh-1=cyc5h8oh-2 | 6.24E+04 | 2.5 | 39357.0 | 4492. | cyptn3oh+ho2=cyptn2oh-1+h2o2 | 1.28E+04 | 2.6 | 12400.0 |
| | | | | | 4493. | cyptn3oh+ch3=cyptn2oh-1+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| | | | | | 4494. | cyptn1oh-1+o2=c5h5oh3+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 |
| | | | | | 4495. | cyptn1oh-2+o2=c5h5oh3+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 |
| | | | | | 4496. | cyptn1oh-2+o2=c5h5oh2+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 |

| | | | | | | | | | |
|-------|--|----------|------|---------|-------|---|----------|-------|---------|
| 4497. | cyptn2oh-1+o2=c5h5oh2+ho2 | 7.90E+11 | 0.0 | 14200.0 | 4541. | cyc5h8o+c2h5<=>bcyc5h7o+c2h6 | 1.00E+11 | 0.0 | 10400.0 |
| 4498. | cyptn2oh-1+o2=c5h5oh1+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15200.0 | 4542. | acyc5h7o=petcoc2h3 | 1.32E+14 | 0.0 | 40511.5 |
| 4499. | cyptn1oh=c5h5oh3+h2 | 1.12E+13 | 0.0 | 60010.0 | 4543. | acyc5h7o=ch2ch2ch2chco | 9.50E+13 | 0.0 | 36687.4 |
| 4500. | cyptn1oh=c5h5oh2+h2 | 1.12E+13 | 0.0 | 60010.0 | 4544. | acyc5h7o=acyc5h6o+h | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4501. | cyptn2oh=c5h5oh2+h2 | 1.12E+13 | 0.0 | 60010.0 | 4545. | bcyc5h7o=ch2coch2c2h3 | 1.39E+13 | 0.0 | 33006.7 |
| 4502. | cyptn2oh=c5h5oh1+h2 | 1.12E+13 | 0.0 | 60010.0 | 4546. | bcyc5h7o=c4h7co | 8.60E+12 | 0.0 | 29110.9 |
| 4503. | cyptn3oh=c5h5oh1+h2 | 2.24E+13 | 0.0 | 55010.0 | 4547. | bcyc5h7o=acyc5h6o+h | 3.00E+13 | 0.0 | 35000.0 |
| 4504. | cyptn1oh-1=c5h5oh3+h | 7.50E+08 | 0.0 | 23000.0 | 4548. | bcyc5h7o=bcyc5h6o+h | 3.00E+13 | 0.0 | 38000.0 |
| 4505. | cyptn1oh-2=c5h5oh3+h | 7.50E+08 | 0.0 | 23000.0 | 4549. | acyc5h7o=>bcyc5h7o | 3.15E+42 | -9.9 | 45227.8 |
| 4506. | cyptn1oh-2=c5h5oh2+h | 7.50E+08 | 0.0 | 23000.0 | 4550. | bcyc5h7o=>acyc5h7o | 6.63E+52 | -13.1 | 44578.0 |
| 4507. | cyptn2oh-1=c5h5oh2+h | 3.25E+08 | 0.0 | 21000.0 | 4551. | petcoc2h3=c2h4+c2h3co | 1.68E+14 | 0.0 | 25262.9 |
| 4508. | cyptn2oh-1=c5h5oh1+h | 7.50E+08 | 0.0 | 23000.0 | 4552. | ch2ch2ch2chco=c2h4+c2h3co | 5.69E+13 | 0.0 | 25000.0 |
| 4509. | cpd+oh=>cyptn2oh-1 | 4.60E+12 | 0.0 | 70.0 | 4553. | ch2coch2c2h3=>ch2co+c3h5-a | 3.92E+13 | 0.0 | 30377.6 |
| 4510. | cyptn2oh-1=>cpd+oh | 9.62E+13 | 0.0 | 40670.0 | 4554. | c4h7co=>co+c4h714 | 6.08E+14 | 0.0 | 15559.3 |
| 4511. | cyc5h8o<=>acyc5h7o+h | 1.23E+14 | 0.4 | 91069.0 | 4555. | c4h7co=>ch2co+c3h5-a | 5.50E+11 | 0.0 | 16419.7 |
| 4512. | cyc5h8o<=>bcyc5h7o+h | 1.00E+16 | 0.0 | 94990.0 | 4556. | acyc5h7o+o2=ho2+acyc5h6o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4513. | cyc5h8o=c2h4+c2h4+co Declared duplicate reaction... | 1.51E+27 | -3.5 | 85301.0 | 4557. | bcyc5h7o+o2=ho2+acyc5h6o | 1.58E+12 | 0.0 | 2500.0 |
| 4514. | cyc5h8o=c2h4+c2h4+co Declared duplicate reaction... | 1.62E+23 | -2.0 | 85707.0 | 4558. | bcyc5h7o+o2=ho2+bcyc5h6o | 1.58E+12 | 0.0 | 5000.0 |
| 4515. | cyc5h8o=cyptn1oh | 7.77E+16 | -1.0 | 76004.0 | 4559. | acyc5h6o+oh=a-acyc5h5o+h2o | 1.85E+02 | 3.2 | -1944.1 |
| 4516. | cyc5h8o+h=acyc5h7o+h2 Declared duplicate reaction... | 5.28E+06 | 2.2 | 4326.0 | 4560. | acyc5h6o+h<=>a-acyc5h5o+h2 Declared duplicate reaction... | 2.64E+06 | 2.2 | 4326.0 |
| 4517. | cyc5h8o+h=acyc5h7o+h2 Declared duplicate reaction... | 6.78E+06 | 2.1 | 2581.3 | 4561. | acyc5h6o+h<=>a-acyc5h5o+h2 Declared duplicate reaction... | 3.39E+06 | 2.1 | 2581.3 |
| 4518. | cyc5h8o+oh=acyc5h7o+h2o | 2.34E+03 | 3.0 | -1623.4 | 4562. | acyc5h6o+o<=>a-acyc5h5o+oh Declared duplicate reaction... | 2.09E+05 | 2.5 | 3776.3 |
| 4519. | cyc5h8o+ho2=acyc5h7o+h2o2 | 9.91E-04 | 4.7 | 10014.5 | 4563. | acyc5h6o+o<=>a-acyc5h5o+oh Declared duplicate reaction... | 1.33E+05 | 2.4 | 2055.4 |
| 4520. | cyc5h8o+ch3=acyc5h7o+ch4 Declared duplicate reaction... | 1.10E+02 | 3.3 | 6022.9 | 4564. | acyc5h6o+ho2<=>a-acyc5h5o+h2o2 | 4.95E-04 | 4.7 | 10014.5 |
| 4521. | cyc5h8o+ch3=acyc5h7o+ch4 Declared duplicate reaction... | 6.76E+01 | 3.2 | 4469.4 | 4565. | acyc5h6o+ch3<=>a-acyc5h5o+ch4 Declared duplicate reaction... | 5.49E+01 | 3.3 | 6022.9 |
| 4522. | cyc5h8o+o=acyc5h7o+oh Declared duplicate reaction... | 4.18E+05 | 2.5 | 3776.3 | 4566. | acyc5h6o+ch3<=>a-acyc5h5o+ch4 Declared duplicate reaction... | 3.38E+01 | 3.2 | 4469.4 |
| 4523. | cyc5h8o+o=acyc5h7o+oh Declared duplicate reaction... | 2.66E+05 | 2.4 | 2055.4 | 4567. | acyc5h6o+oh<=>b-acyc5h5o+h2o | 3.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4524. | cyc5h8o+h=bcyc5h7o+h2 Declared duplicate reaction... | 4.10E+06 | 2.3 | 5879.5 | 4568. | acyc5h6o+h<=>b-acyc5h5o+h2 | 5.40E+04 | 2.5 | -1900.0 |
| 4525. | cyc5h8o+h=bcyc5h7o+h2 Declared duplicate reaction... | 3.42E+06 | 2.3 | 4421.6 | 4569. | acyc5h6o+o<=>b-acyc5h5o+oh | 8.80E+10 | 0.7 | 3250.0 |
| 4526. | cyc5h8o+oh=bcyc5h7o+h2o | 1.33E+05 | 2.6 | -1243.9 | 4570. | acyc5h6o+ho2<=>b-acyc5h5o+h2o2 | 6.40E+03 | 2.6 | 12400.0 |
| 4527. | cyc5h8o+ho2=bcyc5h7o+h2o2 | 5.45E-02 | 4.3 | 11836.6 | 4571. | acyc5h6o+ch3<=>b-acyc5h5o+ch4 | 1.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4528. | cyc5h8o+ch3=bcyc5h7o+ch4 Declared duplicate reaction... | 1.70E+01 | 3.5 | 7935.0 | 4572. | bcyc5h6o+oh<=>b-acyc5h5o+h2o | 6.00E+06 | 2.0 | -1520.0 |
| 4529. | cyc5h8o+ch3=bcyc5h7o+ch4 Declared duplicate reaction... | 1.94E+01 | 3.5 | 6859.5 | 4573. | bcyc5h6o+h<=>b-acyc5h5o+h2 | 1.08E+05 | 2.5 | -1900.0 |
| 4530. | cyc5h8o+o=bcyc5h7o+oh Declared duplicate reaction... | 1.03E+05 | 2.6 | 2605.2 | 4574. | bcyc5h6o+o<=>b-acyc5h5o+oh | 1.76E+11 | 0.7 | 3250.0 |
| 4531. | cyc5h8o+o=bcyc5h7o+oh Declared duplicate reaction... | 1.41E+05 | 2.5 | 1577.4 | 4575. | bcyc5h6o+ho2<=>b-acyc5h5o+h2o2 | 1.28E+04 | 2.6 | 12400.0 |
| 4532. | cyc5h8o+o2=acyc5h7o+ho2 | 8.04E+13 | 0.0 | 45850.0 | 4576. | bcyc5h6o+ch3<=>b-acyc5h5o+ch4 | 2.00E+11 | 0.0 | 7300.0 |
| 4533. | cyc5h8o+o2=bcyc5h7o+ho2 | 7.94E+13 | 0.0 | 47690.0 | 4577. | b-acyc5h5o=co+nc4h5 | 1.62E+56 | -11.9 | 72570.0 |
| 4534. | cyc5h8o+ch3o<=>acyc5h7o+ch3oh | 1.15E+12 | 0.0 | 4573.0 | 4578. | a-acyc5h5o=c2h2+c2h3co | 3.61E+12 | 0.4 | 42183.0 |
| 4535. | cyc5h8o+ch3o<=>bcyc5h7o+ch3oh | 2.90E+11 | 0.0 | 4570.0 | 4579. | b-acyc5h5o+o2=c2h3cho+co+hco | 1.70E+09 | 1.0 | 26400.0 |
| 4536. | cyc5h8o+ch3o2<=>acyc5h7o+ch3o2h | 6.88E+12 | 0.1 | 17880.0 | 4580. | b-acyc5h5o+ho2=>c2h3chcho+co+oh | 4.50E+12 | 0.0 | 0.0 |
| 4537. | cyc5h8o+ch3o2<=>bcyc5h7o+ch3o2h | 4.07E+01 | 3.6 | 14810.0 | 4581. | c5h4o+h=b-acyc5h5o | 1.68E+49 | -10.8 | 17950.0 |
| 4538. | cyc5h8o+c2h3<=>acyc5h7o+c2h4 | 6.00E+11 | 0.0 | 5600.0 | 4582. | b-acyc5h5o+o2=c5h4o+ho2 | 1.58E+12 | 0.0 | 15000.0 |
| 4539. | cyc5h8o+c2h3<=>bcyc5h7o+c2h4 | 8.00E+11 | 0.0 | 16800.0 | | | | | |
| 4540. | cyc5h8o+c2h5<=>acyc5h7o+c2h6 | 6.00E+11 | 0.0 | 8600.0 | | | | | |

Annexe 5.1

**Conditions expérimentales utilisées
au cours de cette thèse et les
résultats obtenus.**

- **Résultats expérimentaux des délais mesurés et simulés**

- **$\phi=0.5$ diluent (80% Ar/20%N₂ ; 30%Ar/70%N₂)**

| P₀ (bar) | T₀ (K) | P_c (bar) | T_c (K) | 1000/T_c | DAI (ms) |
|----------------------------|--------------------------|----------------------------|--------------------------|---------------------------|-----------------|
| 1.974 | 98.3 | 40.715442 | 937.2 | 1.06700811 | 2.697 |
| 1.966 | 98.3 | 40.68322 | 938.1 | 1.06598444 | 3 |
| 1.972 | 98.3 | 40.432523 | 935.5 | 1.06894709 | 3 |
| 1.959 | 85.2 | 40.535973 | 908.5 | 1.10071547 | 7.329 |
| 1.960 | 85.2 | 40.415372 | 907.6 | 1.10180696 | 7.367 |
| 1.961 | 85.2 | 40.892411 | 910.5 | 1.09829764 | 7.633 |
| 2.060 | 96.5 | 37.841207 | 816.2 | 1.2251899 | 88.634 |
| 2.055 | 96.5 | 37.458334 | 814.5 | 1.22774708 | 87.761 |
| 2.060 | 96.5 | 37.346926 | 813.4 | 1.22940743 | 85.937 |
| 2.055 | 96.5 | 35.807597 | 805.3 | 1.24177325 | 86.393 |
| 2.058 | 96.5 | 37.039018 | 811.9 | 1.23167878 | 80.849 |
| 2.150 | 85 | 39.542818 | 793.7 | 1.25992188 | 102.912 |
| 2.150 | 85 | 38.999285 | 790.9 | 1.26438235 | 97.671 |
| 2.150 | 85 | 39.290464 | 792.4 | 1.26198889 | 92.697 |
| 2.171 | 104 | 39.09791 | 826.7 | 1.20962864 | 55.634 |
| 2.167 | 104 | 38.934145 | 826.1 | 1.2105072 | 57 |
| 2.169 | 104 | 38.857944 | 825.6 | 1.21124031 | 56.849 |
| 2.170 | 104 | 38.990421 | 826.2 | 1.21036069 | 56.241 |
| 2.200 | 114.5 | 39.534496 | 846.6 | 1.18119537 | 36.456 |
| 2.201 | 114.5 | 39.516531 | 846.4 | 1.18147448 | 39.114 |
| 2.201 | 114.5 | 39.176099 | 844.7 | 1.18385226 | 40.329 |
| 2.215 | 130 | 39.146166 | 873.1 | 1.14534418 | 21.001 |
| 2.212 | 130 | 38.968565 | 872.3 | 1.14639459 | 22.519 |
| 2.213 | 130 | 38.843835 | 871.5 | 1.14744693 | 22.367 |

- $\phi=1$ diluent (20%Ar/80%N₂)

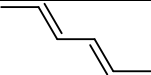
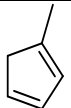
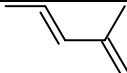
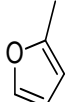

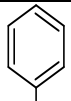
| T ₀ (K) | P ₀ (bar) | P _c (bar) | T _c (K) | 1000/T _c | DAI (ms) |
|--------------------|----------------------|----------------------|--------------------|---------------------|----------|
| 94.5 | 2.313 | 41.971921 | 757.7 | 1.31978356 | 99.304 |
| 94.5 | 2.266 | 40.706803 | 755.9 | 1.32292631 | 91.786 |
| 112 | 2.281 | 38.979774 | 777.8 | 1.28567755 | 55.937 |
| 112 | 2.286 | 39.174104 | 778.6 | 1.28435654 | 50.24 |
| 133 | 2.311 | 38.95605 | 812.4 | 1.23092073 | 31.064 |
| 133 | 2.329 | 38.90134 | 810.7 | 1.23350191 | 31.975 |
| 145 | 2.359 | 40.10129 | 834.8 | 1.19789171 | 17.393 |
| 145 | 2.358 | 39.891888 | 833.9 | 1.19918455 | 19.633 |
| 157 | 2.379 | 39.77213 | 852.4 | 1.17315814 | 12.608 |
| 157 | 2.372 | 39.488276 | 851.6 | 1.17426022 | 14.545 |
| 172 | 2.399 | 39.359746 | 874.5 | 1.14351058 | 7.329 |
| 172 | 2.401 | 39.158091 | 873.4 | 1.14495077 | 8.849 |

- Conditions expérimentales utilisées en réacteur parfaitement agité

| Carburant | P (atm) | Richesse | τ (ms) | X _{carburant} (ppm) | T (K) |
|-----------|---------|----------|-------------|------------------------------|----------|
| Fenchone | 10 | 0,5-1-2 | 0.7s | 1000 | 750-1200 |

Listes des espèces détectées au cours de l'étude expérimentales (1000 ppm de fenchone ;
 $p=10$ atm ; $\tau = 0.7$ s ; $\phi = 2$)

| Espèces | Structure | Formule brute |
|---------------------|-----------|---------------------------------|
| Methane | | CH ₄ |
| Ethylene | | C ₂ H ₄ |
| Ethane | | C ₂ H ₆ |
| Propene | | C ₃ H ₆ |
| Propane | | C ₃ H ₈ |
| Acetaldehyde | | C ₂ H ₄ O |
| Butene | | C ₄ H ₈ |
| Acetone | | C ₃ H ₆ O |
| allene | | C ₃ H ₄ |
| trans-2-butene | | C ₄ H ₈ |
| 1-butene | | C ₄ H ₈ |
| isobutene | | C ₄ H ₈ |
| cis-2-butene | | C ₄ H ₈ |
| propyne | | C ₃ H ₄ |
| 1,3-butadiene | | C ₄ H ₆ |
| trans-2-pentene | | C ₅ H ₁₀ |
| cyclopentene | | C ₅ H ₈ |
| 1-pentene | | C ₅ H ₁₀ |
| cis-2-pentene | | C ₅ H ₁₀ |
| xylene | | C ₈ H ₁₀ |
| 2-butyne | | C ₄ H ₆ |
| isoprene | | C ₅ H ₈ |
| methyl-cyclopentene | | C ₆ H ₁₀ |
| 2-methyl-2-pentene | | C ₆ H ₁₂ |
| 1,4-pentadiene | | C ₅ H ₈ |
| trans-2,4-hexadiene | | C ₆ H ₁₀ |

| | | |
|------------------------------|---|-------------|
| cis-2,4-hexadiene |  | C_6H_{10} |
| 1-methyl-1,3-cyclopentadiene |  | C_6H_8 |
| methyl-pentadiene |  | C_6H_{10} |
| 2-methyl-furan |  | C_5H_6O |
| benzene |  | C_6H_6 |
| toluene |  | C_7H_8 |

Lydia BOUALEM
**Etude expérimentale et numérique de la cinétique
d'oxydation de la fenchone, un additif à haute densité
énergétique**

La formulation d'additifs multifonctionnels issus des terpènes cycliques est une solution pour améliorer simultanément plusieurs propriétés des carburants automobiles. Les composés présentant des tensions de cycle sont utilisés dans le domaine aérospace en raison de leur densité énergétique, le présent travail est cependant lié à des applications terrestres (moteurs à piston automobiles).

Plusieurs travaux bibliographiques ont été mis en avant dans la littérature, visant à apporter des informations sur les additifs à haute densité énergétiques dont les polycycliques comme le norbornane, ethylnorbornane et leur dérivé oxygéné tels que le camphre et la fenchone.

Dans le cadre de ce projet, on s'est intéressé à la fenchone, pouvant être considérée non seulement comme un additif carburant mais aussi comme un intermédiaire de combustion du triméthylnorbornane. Cette étude a pour objectif de caractériser la cinétique d'oxydation en phase gazeuse de la fenchone par deux approches, expérimentale et numérique, afin de rationaliser les importances respectives de voies réactionnelles mise en jeu. Deux dispositifs expérimentaux ont été utilisés pour cette étude (réacteur auto-agité par jets gazeux, machine à compression rapide).

Dans un premier temps, les expériences ont été réalisées en réacteur à jets gazeux sous des conditions expérimentales de température allant de 750-1120 K, à une pression de 10 atm et pour des richesses [0.5-1-2]. En deuxième partie, les mesures des délais d'auto-inflammation du mélange fenchone/air/inertes en fonction des températures à la fin de la compression ont été réalisées sous deux conditions de richesses [0.5-1], une pression de 40 bars. Enfin, un mécanisme cinétique développé afin de reproduire ces résultats, ainsi l'accord entre les données expérimentales et simulation semble être satisfaisant pour un tel composé complexe.

**Experimental and modeling study of the oxidation of fenchone,
a high-energy density fuel-additive**

The formulation of multifunctional additives from cyclic terpenes is a solution to improve several properties of automotive fuels simultaneously. Compounds with ring tensions are used in the aerospace field because of their energy density, but the present work is related to terrestrial applications (automotive piston engines).

Several studies have been carried out in the literature, aiming to provide information on high energy density additives including polycyclic compounds such as norbornane, ethylnorbornane and their oxygenated derivatives such as camphor and fenchone.

This project focused on fenchone which can be considered not only as a fuel additive but also as a combustion intermediate of trimethylnorbornane.

The aim of this study is to characterise and quantify the gas-phase oxidation kinetics of fenchone using two approaches, experimental and numerical, in order to rationalise the respective importance of the reaction pathways involved.

Two experimental set-ups were used for this study (jet stirred-reactor, rapid compression machine). In the first part, the experiments were performed in a gas jet reactor under experimental temperature conditions ranging from 750-1120 K, at a pressure of 10 atm and for ratios [0.5-1-2]. In the second part, measurements of the ignition delay times of the fenchone/air/inert gas mixture as a function of the temperatures at the end of the compression were carried out under two conditions of ratio[0.5-1], a pressure of 40 bars. Finally, a kinetic mechanism was developed to reproduce these results, so that the agreement between experimental and simulation data seems to be satisfactory for such a complex compound.



**Institut de Combustion,
Aérothermique, Réactivité et
Environnement**



1C, Avenue de la Recherche Scientifique
45071 Orléans, CEDEX 2