

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 Jun2024

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'Orleans
G.DAYMA	Professeur, Université d'Orléans







Remerciements

Les travaux de recherche présentés dans ce manuscrit ont été réalisés à l'Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement (ICARE) à Orléans, cette thèse a été financée par le LABEX CAPRYSSES (Cinétique chimique et Aérothermodynamique 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. Phillipe 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.

Inti	oductio	on	1
1	Contex	xte	1
2	Cadre	et objectifs de la thèse	5
Cha	pitre 1	: Bibliographie	.10
1	.1 1.1.1	Les carburants à haute densité énergétique Fenchone	.11 .11
	1.1.2	Carburants polycycliques	.14
	1. 1. 1. 1. 1.	 1.2.1 Norbornane C₇H₁₂ 1.2.2 Ethylnorbornane 1.2.3 Exo-tétrahydrodicyclopentadiène (JP-10) 1.2.4 Les pinènes et le camphène 1.2.5 Camphre 	.15 .16 .18 .19 .19
1	.2	Impact de la tension de cycle et des substituants (carbonyle, méthyle)	.21
1	.3	Conclusion	.22
Réf	érence o	lu chapitre 1	.23
Cha	apitre 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
Réf	érences	du chapitre 2	.41
Cha	apitre 3	: Modélisation	.43
3	.2.1	Fichier " Mécanisme.inp "	.44

Table des matières

3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.4.2	Réaction de β -scission	
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.4.2	Réaction de β-scission	66
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression	4.2.4.2	Réaction de β-scission	66
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.4.1	Déaction de 9 aciesien	01
3.2.2 Les constantes de vites de vites de upendantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.4.1	Les réactions de métathèse avec H et le radical CH3	61
3.2.2 Les constantes de viresse dependantes de la pression	1.2.1	Les réactions de métathèse avec H et le radical CH.	61
3.2.2 Les constantes de viesse dependances de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.4	Discussion sur le mécanisme cinétique développé	59
3.2.2 Les constantes de viesse dependances de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.4	Discussion sur le mécanisme cinétique développé	59
3.2.2 Les constantes de viesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.3	Bases de données RMG	
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.3	Bases de données RMG	
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression	4.2.2	La représentation des espèces et des groupes fonctionnels	57
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.1	Principe de fonctionnement du logiciel RMG	56
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2.1	Dringing de fongtionnement du logicial DMC	56
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	4.2 Const	ruction du mécanisme cinétique	56
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression		4.1.1.2 Les reactions d'oxydation à basse temperature	33
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression		4.1.1.2 Les réactions d'oxydation à basse température	55
3.2.2 Les constantes de vitesse dépendantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "		4.1.1.1 Les réactions d'oxydation à haute température	54
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	7.1.1		
3.2.2 Les constantes de vitesse dépendantes de la pression	4.1.1	Mécanismes de combustion	54
3.2.2 Les constantes de vitesse dépendantes de la pression	4 1 1		F 4
3.2.2 Les constantes de vitesse dépendantes de la pression	4.1 Méca	nismes de combustion des hydrocarbures	54
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression	Chapitre 4	•	
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression	Chanitre 4		53
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression	References	s du chapitre 3	51
 3.2.2 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	Flame- S	speed)	
 3.2.2 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	Flame- S	Speed)	
 3.2.2 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	3.3.1	La librairie PREMIX de flamme laminaire premélangée (Premix	ed Laminar
 3.2.2 Le s'econstantes de vitesse dependantes de la pression			
3.2.2Les constantes de vitesse dependantes de la pression	3.3.2	Le modèle de réacteur homogène fermé (Closed Homogenous Batch F	Reactor)49
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression45 3.2.3 Le fichier de données thermodynamiques " therm.dat "	3.3.1	Le modèle de reacteur continu parfaitement agité (Perfectly Stirred Re	eactor)48
3.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression	5.2.4 3.3.1	Le nondèle de réacteur continu parfaitement agité (Perfectly Stirred Pe	(1)
3.2.2Les constantes de vitesse dependantes de la pression	374	Le fichier de données de transport " tran dat "	17
5.2.2 Les constantes de vitesse dependantes de la pression	3.2.3	Le fichier de données thermodynamiques "therm.dat "	46
322 Les constantes de vitesse dépendantes de la pression 45	3.2.2	Les constantes de vitesse dépendantes de la pression	45

Table des matières

Références bibliographiques	
Annexes	117

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
Figure 4. Diméniaction et l'isoméniaction de 6 ninère
Figure 4 : Dimensation et l'isomerisation de p-pinene
$\mathbf{F}_{\mathbf{r}} = 1 1 \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}} + $
Figure 1. 1: Structure de la L-lenchone (a gauche) et la configuration chaise (a 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]
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 ₇ H ₁₂ et la
configuration bateau (à droite)
Figure 1.5 : Radicaux norbornyles obtenus par métathèse
Figure 1.6 : Radicaux produits par B-scission 16
Figure 17 : Structreture 2-ethylbicyclo [2 2 1] hentane
Figure 1.8 · Dyrolyse du bicyclo[2-2-1]bent-2-ène(Norbornène) 17
Figure 1. 6.1 yrotyse du ole yelo[2-2-1]hept-2-ene(10000011ene).
Figure 1.9. Structure de l'exo-terranydrodicyclopentadiene
Figure 1.10 : Structure du campire $C_{10}H_{16}O$
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
Figure 2. 2:Spectre infrarouge de la fenchone à T cellule = 145° C, P=200 mbar34
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, τ =0.7s et φ =136
Figure 2. 4: Schéma de la MCR de PRISME (Université d'Orleans).
Figure 2. 5: Profil de pression d'un essai réalisé en machine à compression rapide ($\omega=0.5$
$T_c=794$ K $P_c=39.62$ har diluent (Ar 70%-N2=30%)) 40
10 - 77 + 13, 10 - 57, 020 ar, unucli (11 7070 - 112 - 5070)).
Figure 3 1. L'évolution des constantes de vitesse selon les trois régimes liés à la pression [6]
rigure 5. 1. 12 evolution des constantes de vitesse scion les trois regnites nes à la pression [0].

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
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 CH3 (à droite) pour former F1(en haut) et F2 (en bas)
proposées par le RMG avec celles qui servent de références
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 F463
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 F565
Figure 4.8 : Voies de décompositions du radical F167
Figure 4. 9: Voies de décompositions du radical F2
Figure 4. 10: Voies de décompositions du radical F369
Figure 4. 11: Voies de décompositions du radical F470
Figure 4. 12: Voies de décompositions du radical F571
Figure 4. 13: Voies de décompositions du radical F672
Figure 4. 14: Structure hiérarchique d'un mécanisme cinétique77

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, $X_{f,0} = 1000$ ppm84
Figure 5. 2: Evolution des fractions molaires du benzène en fonction de la température pour
trois conditions de richesse (φ =0,5-1-2), à p = 10 atm, τ = 0,7 s85
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
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
Figure 5. 5: Résultats obtenus en milieu riche $\varphi = 2$ en réacteur parfaitement agité à 10 atm, τ
= 0,7 s, pour 1000 ppm de fenchone
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)
Figure 5. 7 : Voies de formation du benzène à $p = 10$ atm et $\tau = 0,7s$
Figure 5. 8: Effet de la richesse sur l'évolution des délais d'auto-inflammation94
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
Figure 5. 10: Délai d'auto-inflammation des mélanges fenchone/O2/diluant à la richesse 0,5 et
1
Figure 5. 11: Analyse de sensibilité sur OH durant l'auto-inflammation du mélange
stæchiométrique fenchone/O ₂ /diluent, $Tc = 875$ K, $pc = 40$ bar, à 20% de consommation de
fuel101

Listes des figures, tableaux

Figure	5.	12	:	Analyse	de	sensibilité	sur	HO_2	durant	l'auto-inflan	nmation	du	mélange
stœchio	mét	triqu	le	fenchone	O_{2}	diluent, Tc	= 87	75 K,	Pc = 40	bars, à 20%	de cons	omn	nation de
carbura	nt		•••										102

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
Tableau 4. 1: Paramètres d'Arrhenius pour les constantes de vitesse des réactions de métathèse avec H et CH ₃
Tableau 4. 2 : Paramètres cinétiques (unités en cm, mol, cal, s) des réactions d'abstraction parO, OH, HO2
Tableau 4. 3 :Constantes de vitesse du mécanisme de la fenchone (A :cm3. mol-1.s-1,Ea :cal.mol ⁻¹).
Tableau 4. 4 :Liste des réactions les plus sensibles pour le calcul du délai d'auto-inflammation aux basses températures
Tableau 5. 1:Compositions des mélanges utilisés pour les expériences en RCM.
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%-N ₂ =70 %),(Ar = 60%-N ₂ =40 %)
Tableau 5. 3:Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en

machine à compression rapide à $\varphi = 0.5$, $p_c = 40$ bar, diluent (Ar = 70% - N ₂ = 30 %	%),(Ar =80%-
N ₂ =20 %).	
Tableau 5. 4 :Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de	la fenchone en
machine à compression rapide à $\varphi = 1$, $p_c = 40$ 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 $\varphi = 0,5$ et $\varphi = 1$	99

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 Fourrier
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
1	carbone
JSR	Réacteur auto-agité par jets gazeux
MCR	Machine à Compression Rapide
Р	Pression en atm
φ	Richesse
Ť	Température en K
τ	Temps de passage en s
m	Masse de ce composé en kg
Μ	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
Vr	Volume du réacteur en m ³
Qe	Débit volumique total entrant dans le réacteur m ³ . s ⁻¹
ТО	Température ambiante en K
PO	Pression ambiante en atm
Р	Pression au sein du réacteur en atm
Т	Température du réacteur.
Pc	Pression de fin de compression,
γ	Rapport des capacités calorifiques
Ср	Capacité calorifique à pression constante
Cv	Capacité calorique à volume constant
k	Constante de vitesse
Α	Facteur pré exponentiel
Т	Température en K
Ea	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
Н	Enthalpie
ωi	Vitesse molaire nette de réaction de l'espèce i
Wi	Masse molaire de l'espèce i
Di	Coefficient de diffusion

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 CO_2 dans le secteur des transports [1-2]. Une autre voie de décarbonation des transports est l'utilisation de carburants synthétiques à faibles émissions CO_2 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 CO_2 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'alcanes 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].

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 énergétiques 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'a-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'a-pinène suivi d'une estérification du camphène et hydrolyse [14].



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 C₂₀, (*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.



Carburants à haute densité énergétiques

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

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 l'endode 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.

2 Cadre et objectifs de la thèse

Cette thèse a été financée par le LABEX CAPRYSSES (Cinétique chimique et Aérothermodynamique 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.

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.

- 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, nº 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, nº 1, Art. nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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:

Renewable jet fuel technologies: commercialisation status and future prospects », *Biofuels*, *Bioprod. Bioref.*, vol. 10, nº 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, nº 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, nº 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.
- M. R. Raupach *et al.*, « Global and regional drivers of accelerating CO 2 emissions », *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 104, nº 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, nº 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, nº 2, p. 141-148, févr. 2017, doi: 10.1289/EHP299.
- K. Mukhopadhyay, K. M. Krishna, et M. Sharon, « Fullerenes from camphor: A natural source », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, nº 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, nº 1, Art. nº 1, févr. 2016, doi: 10.1038/srep21286.

Chapitre I Bibliographie

Chapitre 1 : Bil	oliographie	10
1.1	Les carburants à haute densité énergétique	11
1.1.1 Fend	chone	11
1.1.2 Carl	ourants polycycliques	14
1.1.2.1	Norbornane C ₇ H ₁₂	15
1.1.2.2	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	5 Camphre	19
1.2	Impact de la tension de cycle et des substituants (carbonyle, méthyle)	21
1.3	Conclusion	22
Référence du cl	napitre 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.

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-trimethylbicyclo [2.2.1] heptan-2-one, ou d-1,3,3-trimethyl-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).

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

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]

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

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].

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 $\varphi = 1,1$ et en mélange pauvre la vitesse est comprise entre 40 cm.s⁻¹ et 50 cm.s⁻¹.



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.

1.1.2.1 Norbornane C7H12

C'est un composé polycyclique ayant une densité énergétique de 0,854 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.



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 g.cm⁻³ à 298 K et un PCI de 42,8 MJ.kg⁻¹ [37].



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

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 $K \le T \le 1098 K$, 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'ethylnorbornane 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 ßscission (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).

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 g.mL⁻¹ et son pouvoir calorifique de 39,6 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 : Structrcture 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

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'hydroxymenthenone. 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 mm².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

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.

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 définit 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 norbornene faisant intervenir une rotation du biradical qui se décompose en cyclopentadiene 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 tendu, 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.

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 énergétiques. 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.
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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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. Nozi`ere, et J.-F. Müller, « Alpha-pinene oxidation by OH: simulations of laboratory experiments », *Atmospheric Chemistry and Physics*, vol. 4, n^o 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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 $\dot{O}H$ for T = 500–2000 K. Part I: hydrogen-abstraction from H3CC(O)CH3–

x(CH3)x, $x = 0 \mapsto 2$ », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 13, n^o 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, nº 3, p. 2144-2155, mars 2017, doi: 10.1021/acs.energyfuels.6b02061.

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.

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 cm³ 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*.





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.

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) :

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

Avec :

 τ Temps de passage en s

V_r Volume du réacteur en m³

Qe Débit volumique total entrant dans le réacteur m³. s⁻¹

T₀ Température ambiante en K

- P₀ 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 :

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

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

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

Où :

ce qui fournit le débit liquide correspondant :

- m Masse de ce composé en kg.
- M Masse molaire du composé en kg.mol⁻¹
- R Constante des gaz parfaits 8.314 J.K⁻¹.mol⁻¹
- ρ Masse volumique du composé liquide en kg.m⁻³

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

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 ($T_{vapo} = 200 \circ C$) 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).

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, $T_{cellule} = 145$ ° C, P= 200 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.



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 utilisées :

- 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.

 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 apparait 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.

Appareil	Colonne	Gaz vecteur	Programme	Espèces mesurées	Détecteur
	CP-SIL 5CB				
Shimadzu GC2010 Plus	L=25m				
	D _{int} =0,32mm				
	$D_f=1,2\mu m$	Ца	Variable	Hydrocarbures et	FID/MS
	Couplée avec	$\int \frac{1}{2}$		Espèces oxygénées	
	DB1	0,71112.11111			
	L=30m				
	D _{int} =0,53mm				
	$D_f=3\mu m$				
	CP-Carboplot P7				TCD
Varian	L=25m	N_2	$T_0=50^{\circ}C$	H_2, O_2	
3300	D _{int} =0,53mm	15mL.min ⁻¹	Isotherme :5min		
	$D_f=50\mu m$				
Shimadzu	CP-Al ₂ O ₃ /KCl		$T_0=70^{\circ}C$	Hydrocarbures non-	FID
GC2010	L=50m	He	$\Delta T=10^{\circ}/min$	oxygénés	
Plus	D _{int} =0,32mm	1,5mL.min ⁻¹	$T_f=200^{\circ}C$		
	$D_f=5\mu m$		Isotherme :10min		

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

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, τ =0.7s et φ =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

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'entrainer 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]



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

La pression d'admission est mesurée par un transducteur de pression piézoéléctrique *Keller PAA-33X/80794* tandis que l'historique de la pression de la chambre de combustion est enregistré par un transducteur piézoéléctrique *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 :

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

Où T_c et P_c sont la température et la pression à la fin de la compression et T₀, P₀ la température et pression d'admission, γ rapport des capacités calorifiques $\left(\frac{C_p}{C_n}\right)$ à volume et pression constans.

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

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

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'autoinflammation) 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 O_2 est remplacé par N_2 dont les capacités calorifiques sont proches. Cela implique que les conditions initiales (P_0 , T_0) 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*.



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

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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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^o 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, nº 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^o -9.

Chapitre III

Outils de modélisation de réacteurs idéaux

Chapitre 3	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 3.3.1	Le fichier de données de transport " tran.dat " Le modèle de réacteur continu parfaitement agité (Perfectly Stirred Reactor)	47 48
3.3.2	Le modèle de réacteur homogène fermé (Closed Homogenous Batch Reactor)	49
3.3.1 Flame- S	La librairie PREMIX de flamme laminaire premélangée (Premixed Lamin Speed)	iar 50
References	s 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.

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 librairies 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

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 :

$$0 + 0 + M = 02 + M$$
 $6.165E+015 -0.500 0.0$

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

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 « energisé » 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 (ai) 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	160 1	G	100.000	5000.000	987.66	1
2.17239490E+01	5.04228	447E-02	-1.88	467329E-05	3.51547483E-09	-2.53598792E-13	2
-4.21617408E+0	4 -9.371	14554E+	-01 -7	.49053434E-0)1 7.78229370E-	02 3.61552549E-05	3
-9.88264058E-08	4.21593	3278E-1:	1 -3.4	6198953E+0 3	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.

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

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

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

an: les différents coefficients polynômiaux

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 Keq 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 premélangées 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

- 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 $\frac{\varepsilon}{k}$ 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.

3.3 Les différentes librairies 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 :

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

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

- \circ Le temps de séjour τ
- \circ 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 effectés 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 ".

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

3.3.1 La librairie PREMIX de flamme laminaire premélangée (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 :

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

• 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 derivées d'ordre un et deux respectivement.

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, nº 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., vonK.A. Holbrook, M.J.Pilling undS.H.
 Robertson. Wiley, Chichester, 1996. 417 S., geb. 90.00 £ -ISBN 0-417-92268-4 », *Angew. Chem.*, vol. 109, nº 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 lévulinates », These 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		53
4.1 Mécan	ismes de combustion des hydrocarbures	54
4.1.1	Mécanismes de combustion	54
	4.1.1.1Les réactions d'oxydation à haute température4.1.1.2Les réactions d'oxydation à basse température	54 55
4.2 Constr	uction 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 Princip	pe de construction d'un mécanisme cinétique	77
4.4 Conclu	1sion	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.

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 HO[•]₂

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-trimethyl-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 .

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 *Figure4.1*.



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 :

$$R^{\bullet}+O_2 \leftrightarrows RO_2^{\bullet}$$

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

$$R0_2 \rightleftharpoons \cdot QOOH$$

ou par élimination de HO₂ pour former des espèces insaturées.

Les hydroperoxy peuvent réagir entre eux pour donner des radicaux alkoxy RO[•] et libérer de O_2 :

 $RO_2^{\bullet} + RO_2^{\bullet} \rightleftharpoons RO^{\bullet} + RO^{\bullet} + O_2$

Le radical 'QOOH formé précédemment peut subir une cyclisation pour former un éther cyclique et libérer un radical hydroxyle, éliminer un radical HO_2^{\bullet} et former des oléfines :

•Q00H≓ insaturés + carbonyles+ OH•

•Q00H ≓ éthers cycliques+ 0H•

Une deuxième addition sur O2 peut intervenir pour former •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.

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

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].
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 sousmécanisme 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 structurelles 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.



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].

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.

Reactions	R=H			$R=CH_3$		
	Α	n	Ea	Α	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

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

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 CH3 (à droite) pour former F1(en haut) et F2 (en bas) proposées par RMG avec celles qui servent de références.

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 presentées 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.





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.

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

Réactions	Α	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 ×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_2O + $F1(1)$	$1.40 ext{ x10}^{+07}$	1.60	470.9
OH +fenchone = $H_2O + F2(11)$	6.87 x10 ⁺⁰⁵	1.91	875.2
OH +fenchone = $H_2O + F3(5)$	4.64 x10 ⁺⁰⁷	1.61	-35
OH +fenchone = $H_2O + F4(3)$	4.64 x10 ⁺⁰⁷	1.61	-35
OH +fenchone = $H_2O + F5(9)$	1.35 x10 ⁺⁰⁰	3.81	-2897
OH +fenchone = $H_2O + F6(7)$	2.70 x10 ⁺⁰⁰	3.81	-2897
HO_2 +fenchone = H_2O_2 + $F1(1)$	5.6 x10 ⁺¹²	0.0	17686
HO_2 +fenchone = H_2O_2 + $F2(11)$	2.8 x10 ⁺¹²	0.0	16013
HO_2 +fenchone = H_2O_2 + F3(5)	5.6 x10 ⁺¹²	0.0	17686
HO_2 +fenchone = H_2O_2 + $F4(3)$	5.6 ×10 ⁺¹²	0.0	17686
HO_2 +fenchone = H_2O_2 + F5(9)	$1.14 \times 10^{+02}$	3.19	16250
HO_2 + fenchone = H_2O_2 + $F6(7)$	$2.28 \times 10^{+02}$	3.19	16250



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 considérée

s ; 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 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

de vitesse de $4,50 \times 10^{12}$ mol cm⁻³ 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.



Figure 4.8 : Voies de décompositions du radical F1



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



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



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



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



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

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.

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

F1(1) and an all			T.			r	
F1(1) SUD-mech	A	n 1.26	Ea	F5 (9) sub-mech	Α	n	Ea
F1(1) = GD(1) + cns	9.38 E+21	-1.30	20116.2	F5(9) = S(306)	6.39 E+19	-1.80	22481.8
FI(1) = GD(2)	1.13 E+10	-0.48	30110.3	F5(9) = S(33)	9.18 E+11	0.36	16522.2
F1(1) = S(2/9)	4.79 E+13	0.23	2/452.4	F5(9) = S(721)	1.10 E-01	4.21	21839.3
FI(1) = GD(3)	3.98 E+14	-0.07	30695.6	S(33)=co+c9h15 (38)	4.65 E +17	-1.2	16546.1
F1(1) = S(000)	0.92 E+11	0.03	23984.4	S(306) = c2h4 + S(206)	2.43 E+13	0.1	27882.9
GD(2) = c2h4+GD(7)	8.53 E+09	0.76	1/4/4.5	S(260) = ch3 + c7h8o(583)	3.12 E+12	0.5	28006.4
GD(3) = c2n4 + GD(7)	1.66 E+11	0.34	20999.6	S(260) = GD(25)	2.83 E+02	1.62	20154.3
S (660) =1c3n6co+mcptds2	4.55 E+02	2.41	28294.3	C9h15(41) =c9h15(38)	2.32 E+36	-8.1	15327
S(2/9) = co+GD(11)	1.95 E+18	-1.17	16546.1	C9h15(38) =c9h15(392)	1.61 E+07	2.06	20679.5
GD(7) = ch3 + GD(8)	4.74 E+13	0.45	41411.6	C9h15(392) =c2h4+GD(22)	2.09 E+13	0.15	36085.2
$\frac{\mathrm{GD}\left(7\right)=\mathrm{GD}\left(9\right)}{\mathrm{GD}\left(9\right)}$	9.35 E+09	1.64	48145.3	GD (22) =c3h4+ic4h7v	6.66 E+10	1.07	36182.5
GD(9) = co+GD(10)	7.07 E+20	-2.80	31749.3	C9h15(41) =c3h4-a+ GD(23)	5.21 E+15	-0.32	55103.4
GD(11) = GD(12)	1.47 E+05	2.22	56572.1	GD(23) = c2h4 + ic4h7v	5.13 E+10	0.97	35946.8
GD(12) = c2h4+GD(10)	2.09 E +13	0.15	36085.3	S (582) =co+GD(22)	1.22 E+20	-2.11	27286.7
GD(10) = c3h4-p+ic4h7v	5.97 E+13	0.59	43858.5	S(721) = GD(24)	2.71 E+29	-4.70	24898.5
F2 sub-mech	Α	n	Ea	GD (24) =c2h4+ GD (25)	3.76 E6	0.52	29123.5
F2(11) = S(703)	1.32 E +37	-6.76	40216.1	GD (25) =S (2293) +but3mldt	1.76 E+16	0.33	40143.1
F2(11) = S(224)	4.37 E+17	-071	29066.7	S (721) =GD (26)	1.72 E+20	-2.32	11088.4
F2(11) = ZS(16)	4.17 E+43	-8.09	51534.7	GD(26) = ic3h6co+GD(27)	2.27 E+15	0.18	54272
F2(11) = ZS(19) + ch3	2.53 E+11	1.39	87331.4	GD(27) = c3h4-a+c3h5-a	8.11 E+08	1.33	19163.3
S (703) = ZS (20)	1.85 E+11	0.80	26526.3	F6 (7) sub-mech	Δ	n.55	Fa
ZS(20) = dipco-2d4j+c3h4-p	1.60 E+10	0.94	42338.7	E6(7)-S(22)	9.75 E 19	1 1 9	28047
S(224) = ZS(14) + co	3.89 E+18	-1.17	16546.1	F0(7)=S(52)	0.73 E+10	-1.18	26947
ZS (14) =ZS (15)	2.09 E+09	1.53	33299.5	$F_0(7) = S_0(10) + 12$	5.70 E+15	0.10	20039
ZS(23) = c5h8-12d3m+ic4h7	1.14 E +11	0.62	46331.6	F6(7)=ZS(10)+ch3	9.25 E+13	-0.07	28702
F3 sub-mech	Α	n	Ea	S(32) = S(566)	1.94 E+05	2.46	32051
F 3(5) = ZS (1)	1.13 E +12	0.7	28987.2	S(566) = c6h10-14d4m+1c3h5co	7.71 E+10	0.92	21528
F3(5) = S(661)	6.98 E +08	1.3	20704	S(566)=dipco-24d+c3h5-a	9.45 E+13	-0.2	18863
$F_{3}(5) = ZS(2)$	6.02 E +08	14	23134	ZS(6) = dipco-24d+c3h5-a	1.28 E+17	-0.6	31034
75(0) - 25(2)	1 31 E +17	-0.6	33236	S(305) = ZS(7) + co	3.89 E+18	-1.2	16546.1
$\frac{25(1) - 25(3)}{5(661) - mono2dt + io2h6oo}$	5.21 E +20	1 297	11729	ZS(7) = ZS(8)	8.19 E+07	1.68	26190
3 (001) = https://dt+iteshoto	3.21 E +20	-1.367	44726	ZS(7) = ZS(9)	3.06 E+03	3	29223
ZS(2) = ZS(3)	2.34 E +14	-0.4	27350	ZS (8) =isope+ic4h7	1.27 E+12	0.57	29288.7
ZS(3) = ZS(5) + ch3	2.39 E +12	0.6	38280	ZS (9) =isope+ic4h7	1.67 E+10	0.85	18770.1
ZS(3) => con10-13d4m+coc3n3-t mens2dt=mens2dt=h	4.90 E + 13 1.02 E+04	3	30301.1	ZS (11)=ZS(12)	3.30 E +42	-7.90	42876
F4 (3) sub-mech	A	n	50501.1 Fa	ZS(12) = ZS(13)	4.52 E+11	0.31	23268
F4(3) = GD(4) + ch3	AL 1 90 E ±13	n 0.84	Ea 85829.5	ZS(13) = c5h6-124d+c3h5-t+co	6.32 E +10	-0.25	57568
$F_{4}(3) = GD(4) + CD(5)$	1.90 E +13	1.87	24046.0				
$F_{4}(3) = OD(3)$	1.37 E +07	1.07	24940.9				
F 4(3) = GD(6)	4.30 E +09	1.21	28900				
F 4(3) = S (3/6)	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				
65 (1.0) · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	1 49 F+11	1 30	42869.8				

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 energie de liaison.
- Multiplication par 6 des facteurs pré-exponentiels des constantes de vitesse des réactions :
 - Fenchone + $HO_2 \rightleftharpoons F3 + H_2O_2$
 - Fenchone + $HO_2 \rightleftharpoons F4 + H_2O_2$

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

- Fenchone + $CH_3O_2 \rightleftharpoons F3 + CH_3O_2H$
- Fenchone + $CH_3O_2 \rightleftharpoons F4+CH_3O_2H$
- Multiplication par 10 de la constante de vitesse de : $F3 \rightleftharpoons ZS$ (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, l0a 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 suivante



 Un sous mécanisme à basse température a été rajouté : cette modification a permis de prédire les délais les plus longs à la richesse φ = 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
$22. OUO \Longrightarrow 3co+ic4h7v+c3h5-t+h$	1.000E+13	0.0	15000.0	adapted from Peters, CNF 2002

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.

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.

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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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^o 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 2 H 6 and C 3 H 8 », *Int J of Chemical Kinetics*, vol. 44, nº 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, nº 4, p. 620-627, févr. 2002, doi: 10.1039/b108578f.

Chapitre V Résultats et discussion

Chapitre 5	5	82
5.1	Etude en réacteur parfaitement agité	
5.1.1	Interprétation et discussion	
5.1.2	Analyse de voies réactionnelles	90
5.2	Etude expérimentale en machine à compression rapide	
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	
5.3	Conclusion	
Références	s du chapitre 5	

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.

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.



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 : CH₄, C₂H₄, et CH₂O ont été quantifiés avec des fractions molaires maximales de 1000 ppm et 500 ppm pour CH₄ et C₂H₄ respectivement pour le mélange riche. Le profil de CH₄ 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 φ = 2 et φ = 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.

L'acétylène est sous-estimé à $\varphi = 1$ et à $\varphi = 0.5$ 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 $\varphi = 2$ sa fraction molaire atteint presque 200 ppm, alors qu'elle n'est que de 20 ppm à $\varphi = 0.5$.

D'après la *figure 5.2*, les fractions molaires de benzène sont sur-estimées en condition stœchiométrique mais sous-estimées à $\varphi = 2$ 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 $\varphi = 2$ et ces 2 espèces n'apparaissent qu'à l'état de trace à $\varphi = 0,5$ 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 (φ =0,5-1-2), à p = 10 atm, τ = 0,7 s.





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.





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.





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.

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.*





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 :

- F3- Près des trois quarts de F3 se décomposent en 4-isobuténoxy-4-méthyl-1cyclopentène, 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'isomérise 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-ethenyl-2,5-dimethylcyclopent-2en-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.

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 cyclopentadiènyles 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 CH₃+C₅H₅ 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 C₆ 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.

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.

Richesse	φ=0,5							
% inertes	X _{C10H16O}	X _{C10H160} X _{O2}		X _{Ar}			X _{N2}	
60%Ar - 40%N ₂	0,0077	0,0077 (0,2083		0,3135		
70%Ar - 30%N ₂	0,0077	0,0077 (0,2083		(0,2351	
30%Ar - 70%N ₂	0,0077	0,0077		0,2083		0,5487		
80%Ar - 20%N ₂	0,0077	77 0,2083		0,6271		0,1567		
Richesse	φ=1							
% inertes	X C10H10	C10H16O X _{O2}			X _{Ar}		X _{N2}	
50% Ar - 50% N ₂	0,0153	0,0153		0,2067			0,3889	
70% Ar - 30%N ₂	0,0153	0,0153		0,2067			0,2334	
30% Ar - 70%N ₂	0,0153	3	0,2067	0,2067 0,2334			0,5445	

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

• 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 (φ =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 $\varphi = 0,5$. 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 $\varphi = 1$. En effet des essais ont été réalisés à $\varphi = 2$ 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 :
35 expériences ont été réalisées sur le mélange pauvre φ = 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.

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%-N ₂ =70 %												
P ₀ (bar)	T ₀ (K)	P _c (bar)	r	Γ _c (K)	IDT (ms)							
2,1	358,7	38,4	7	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	8	310,29	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	8	328,02	61,48							
2,2	384,7	39,07		838,9	49,89							
2,2	384,5	38,89	5	338,04	50,5							
Diluant $Ar=60\%-N_2=40\%$.												
P ₀ (bar)	T ₀ (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							

Tableau 5. 3:Conditions initiales et de fin de compression pour l'oxydation de la fenchone en
machine à compression rapide à $\varphi = 0.5$, $p_c = 40$ bar, diluent (Ar = 70% - N ₂ = 30 %),(Ar = 80% - 100 M m m m m m m m m m m m m m m m m m m
N ₂ =20 %).

Diluant 70% Ar - 30% N ₂												
P ₀ (bar)	T ₀ (K	()	P _c (ba	ar)	T _c (K)	IDT (ms)						
2	367,	8	39,1	9	892	14,58						
2	362,4	4	39,6	5	888	15,19						
2	362,	1	39,0	7	884	16,37						
2	365,	38,5	9	889,5	14,88							
2	366,	39,2	2	895,24	11,16							
2	366	39,3	8	894,88	11,88							
2	370,4	370,4			903,84	10,18						
2	370,	3	39,4	9	904,84	10,89						
2	370,	6	39,32		902,8	11,08						
	Dil	uant	80% Ai	r - 2	0 % N ₂							
P ₀ (bar)	T ₀ (K)	Pc	(bar)	r .	Γ _c (K)	IDT (ms)						
1,9	36	39	9,42		911,6	6,49						
1,9	362,6	3	9,4		910	7,41						
1,9	362,6	38	8,98	Ģ	910,59	7,59						
1,9	367	38	8,84	Ģ	919,10	6,87						
1,9	370,9	40	0,02	9	929,73	4,59						
1,9	371,5	39	9,78		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.

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

Diluant Ar= 30% -N ₂ = 70 %.													
P ₀ (bar)	T ₀ (K)	,	Γ _c (K)	ID	T (ms)								
2,2	359,5	39,44	,	754,14	1	00,41							
2,2	360	39,77	,	753,17	93,19								
2,2	365	39,24		761,8	8	0,317							
2,2	370,7	39,84	,	771,39	65,887								
2,2	371,4	39,05		766,6	5	58,63							
2,2	371	40,07	,	770,29	5	56,39							
2,2	377	39,64	,	779,07	5	59,69							
2,2	383,1	40,18		791,4	4	17,39							
2,2	388,5	38,67	8	800,07	3	31,89							
2,2	389,1	39,31		802,5	3	31,29							
	Diluan	t Ar=50%-N	$V_2 =$	50 %.									
P ₀ (bar)	$T_0(K)$	P _c (bar)		T _c (K)	IDT (ms)								
2	370,4	37,77	37,77 8		807								
2	370,1	38,63		806		37,29							
2	369,9	38,97		804		37,5							
2,1	370,4	39,2		804	í	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							
	Diluan	t Ar=70%-N	$J_2 =$	30 %.									
P ₀ (bar)	T ₀ (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		883,40	5 4,17								
2,1	387,3	41,49		878,10	5	4,4							

5.2.1 Modélisation et simulation des délais d'auto-inflammation

Les délais d'auto-inflammation ont étés 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 : $\varphi = 0,5$ et $\varphi = 1$.

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 $\varphi = 0,5$ et $\varphi = 1$.

Richesse	0,5	1			
Composition des diluents	80% Ar/20%N ₂	20% Ar/80% N ₂			
Composition des unuants	$30\% Ar/70\% N_2$	2070AI/0070IN2			

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), $\varphi = 0,5$, $T_0 = 96,5$ °C et $P_0 = 2,059$ bar.



Figure 5. 10: Délai d'auto-inflammation des mélanges fenchone/O₂/diluant à la richesse 0,5 et 1.

La *figure 5.10* représente les résultats expérimentaux et de modélisation aux deux richesses $\varphi = 0.5$ et 1 pour les mélanges fenchone/O₂/diluants. Les conditions expérimentales utilisées au cours de cette thèse pour les mélanges réactifs et non réactifs sont présentées en détail en *annexe5.2*.

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 $\varphi = 1$ sont plus courts que ceux mesurés à $\varphi = 0,5$, 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 $\varphi=0,5$ et à $\varphi=1$, 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.

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'autoinflammation, 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, Tc = 875 K, pc = 40 bar, à 20% de consommation de fuel.



Figure 5. 12 : Analyse de sensibilité sur HO₂ durant l'auto-inflammation du mélange stœchiométrique fenchone/O₂/diluent, Tc = 875 K, Pc = 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 :

$$HO_2 + fenchone = H_2O_2 + F3(5)$$

 $HO_2 + fenchone = H_2O_2 + F4(3)$

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 *annexe4.1*.

En revanche, les réactions ajoutées en basse température ont une sensibilité sur OH et HO2, notamment : R4O2= QOOH

$$F4(3) + O2 = R4O2$$

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 (φ = 0,5 et 1).

103

Références du chapitre 5

- [100] V. S. Krasnoukhov, D. P. Porfiriev, I. P. Zavershinskiy, V. N. Azyazov, et A. M. Mebel,
 « Kinetics of the CH 3 + C 5 H 5 Reaction: A Theoretical Study », *J. Phys. Chem. A*, vol. 121, nº 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 C6H12 isomers », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, nº 1, p. 585-592, 2011, doi: 10.1016/j.proci.2010.05.056.

Conclusion et perspectives

Conclusion et perspectives

Ce travaille représente la première étude de la cinétique d'oxydation de la fenchone, un terpène cyclique issus 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 CO_2 à l'échappement.

Cette thèse est le résultat de trois années de travaux de recherches menées à ICARE-CNRS d'Orleans et financés par le Labex CAPRYSSES (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 (φ = 0.5-1-2) ont été choisis 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

(ϕ = 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 réalisé en milieu riche à ϕ = 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.

- 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, nº 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, nº 1, Art. nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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:

Renewable jet fuel technologies: commercialisation status and future prospects », *Biofuels*, *Bioprod. Bioref.*, vol. 10, nº 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, nº 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, nº 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.
- M. R. Raupach *et al.*, « Global and regional drivers of accelerating CO 2 emissions », *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 104, nº 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, nº 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, nº 2, p. 141-148, févr. 2017, doi: 10.1289/EHP299.
- K. Mukhopadhyay, K. M. Krishna, et M. Sharon, « Fullerenes from camphor: A natural source », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, nº 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, nº 1, Art. nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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. Nozi`ere, 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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–x(CH3)x, x = 0 → 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.

- [66] J. J. Evangelista, R. Shinnar, et S. Katz, « The effect of imperfect mixing on stirred combustion reactors », *Symposium (International) on Combustion*, vol. 12, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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^o 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, nº 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, nº 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, nº 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., vonK.A. Holbrook, M.J.Pilling undS.H. Robertson. Wiley, Chichester, 1996. 417 S., geb. 90.00 £ -ISBN 0-417-92268-4 », *Angew. Chem.*, vol. 109, nº 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 lévulinates », These 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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, nº 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^o 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 2 H 6 and C 3 H 8 », *Int J of Chemical Kinetics*, vol. 44, nº 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, nº 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 5 H 5 Reaction: A Theoretical Study », *J. Phys. Chem. A*, vol. 121, nº 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 C6H12 isomers », *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, nº 1, p. 585-592, 2011, doi: 10.1016/j.proci.2010.05.056. Annexes

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)	0
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)	o'
ZS(6)		S(224)	0
ZS(7)		GD(1)	C↓C ⁰
ZS(8)	Y~·\	GD(2)	0
ZS(9)	-ly-	GD(3)	0
ZS(10)		GD(4)	

ZS(11)		GD(5)	
ZS(12)		GD(6)	0.
ZS(13)		GD(7)	
ZS(14)		GD(8)	0
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)	0	GD(13)	0
GD(18)		GD(27)	•
GD(19)		C9H15(38)	\rightarrow
GD(20)		C9H15(392)	·
GD(21)		С9Н15(41)	·
GD(22)		S(306)	
GD(23)	•	S(260)	

S(579)		S(660)	
S(376)		S(306)	
C9H15(41)	La j	S(2244)	
S(2293)	Он	S(582)	°
S(677)	J.o.	S(825)	
GD(24)		С7Н8О(583)	0
GD(25)		S(582)	
GD(26)		S(822)	
Fnone	o		

Annexe 4.2

Mécanisme cinétique développé au cours de cette thèse.

	CONSIDERED WE	IGHT												_					
										26. c2h5oh	G 0 4.6070E+01	300	5000	6	2	1	0	0	0
	1. h 1.0	0797								27. c2c5h10	G 0 7.0135E+01	300	5000	10	5	0	0	0	0
	2. c 12.0	0112								28. t2c5h10	G 0 7.0135E+01	200	3000	10	5	0	0	0	0
	3. 0 15.	9994								29. h2o2	G 0 3.4015E+01	200	6000	2	0	2	0	0	0
	4. n 14.0	0067								30. ch3coch3	G 0 5.8081E+01	200	6000	6	3	1	0	0	0
	5. ar 39.	9480								31. ch2co	G 0 4.2038E+01	200	6000	2	2	1	0	0	0
	6. he 4.0	0260								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
	C									35. ic4h8	G 0 5.6108E+01	300	5000	8	4	0	0	0	0
	D U									36. cpd	G U 6.6104E+01	300	5000	6	5	0	0	0	0
	Р П									3/. ic3h/cho	G 0 7.2108E+01	300	3000	8	4	1	0	0	0
	H A									38. isope	G 0 6.8120E+01	298	5000	8	5	0	0	0	0
	A R									39. ic3h5cho	G 0 7.0092E+01	300	5000	6	4	1	0	0	0
SPECIES	S G MOLECULAR	TEMPER.	ATURE	ELEMENT COUNT						40. but2m2d	G 0 7.0135E+01	200	3000	10	5	0	0	0	0
CONSIDERED	E E WEIGHT	LOW	HIGH	h	С	0	n	ar	he	41. but2mld	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
1. co	G 0 2.8011E+01	200	6000	0	1	1	0	0	0	43. t2c4n8	G U 5.6108E+UI	200	6000	8	4	U	U	U	0
2. 02	G 0 3.1999E+01	200	6000	0	0	2	0	0	0	44. C2C4N8	G U 5.6108E+UI	200	5000	8	4	0	0	0	0
3. co2	G 0 4.4010E+01	200	6000	0	1	2	0	0	0	45. 1C4NIU	G U 5.8124E+UI	300	5000	10	4	0	0	0	0
4. h2o	G 0 1.8015E+01	200	6000	2	0	1	0	0	0	46. Dutyne	G 0 5.4092E+01	200	5000	6	4	0	0	0	0
5. ch4	G 0 1.6043E+01	200	6000	4	1	0	0	0	0	47. Ducynz	G 0 5.4052E+01	200	5000	0	2	2	0	0	0
6. h2	G 0 2.0159E+00	200	6000	2	0	0	0	0	0	48. CHISOCHO	G 0 0.00005E+01	200	5000	10	2	2	0	0	0
7. c2h2	G 0 2.6038E+01	2.00	6000	2	2	0	0	0	0	49. IIC4II9CIIO	C 0 1 0016E+01	300	5000	10	5	1	0	0	0
8. ch2o	G 0 3.0026E+01	200	6000	2	1	1	0	0	0	51 nc6h14	G 0 8 6178E+01	300	5000	14	6	0	0	0	0
9 ch3cho	G 0 4 4054E+01	200	6000	4	2	1	0	0	0	52 c6b12=1	G 0 8 4163E+01	300	5000	12	6	0 0	Ő	0	0
10 c2b5cbo	G 0 5 8081E+01	200	6000	6	2	1	0	0	0	53 c6h12-2	G 0 8 4163E+01	300	5000	12	6	0	0	0	0
11 po2b7cbc	C 0 7 2109E+01	200	5000	0	1	1	0	0	0	54 c6h12=3	G 0 8 4163E+01	300	5000	12	6	Ő	Ő	0	0
12 c2b2cbc	C 0 5 6065E+01	200	6000	0	2	1	0	0	0	55. hexcv5o2	G 0 1.0016E+02	300	4000	12	6	1	Ő	0	0
12. 021130110	G 0 3.0003E+01	200	6000	4	2	1	0	0	0	56 bexcv4o1	G 0 1 0016E+02	300	4000	12	6	1	Ő	Ő	0
13. 02114	G U 2.8034E+01	200	2000	4	2	0	0	0	0	57. hexcv4o2	G 0 1.0016E+02	300	4000	12	6	1	õ	õ	Õ
14. C3N6	G 0 4.2081E+01	298	3000	6	3	0	0	0	0	58. hexcv3o1	G 0 1.0016E+02	300	4000	12	6	1	0	0	0
15. c4h8-1	G 0 5.6108E+01	200	6000	8	4	0	0	0	0	59. c4h612	G 0 5.4092E+01	300	3000	6	4	0	0	Ó	0
16. ch3oh	G 0 3.2042E+01	200	6000	4	1	1	0	0	0	60. c4h2	G 0 5.0061E+01	200	6000	2	4	0	0	0	0
17. c4h6	G 0 5.4092E+01	300	3000	6	4	0	0	0	0	61. pc4h9oh	G 0 7.4124E+01	300	3000	10	4	1	0	0	0
18. c2h6	G 0 3.0070E+01	300	5000	6	2	0	0	0	0	62. cyc5h10	G 0 7.0135E+01	200	6000	10	5	0	0	0	0
19. c3h8	G 0 4.4097E+01	300	5000	8	3	0	0	0	0	63. mcp	G 0 8.4163E+01	300	3000	12	6	0	0	0	0
20. nc4h10	G 0 5.8124E+01	200	6000	10	4	0	0	0	0	64. cvc6h12	G 0 8.4163E+01	300	3000	12	6	0	0	0	0
21. c5h10-1	G 0 7.0135E+01	200	5000	10	5	0	0	0	0	65. cyc6h10	G 0 8.2147E+01	300	3000	10	6	0	0	0	0
22. c3h4-a	G 0 4.0065E+01	200	6000	4	3	0	0	0	0	66. cypentoh	G 0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	0
23. c3h4-p	G 0 4.0065E+01	200	6000	4	3	0	Ó	0	0	67. cyc5h8oh-1	G 0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	0
24 c5h813	G 0 6 8120E+01	300	5000	8	5	0	0	0	0	68. cyc5h8oh-2	G 0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	0
25 c5h814	G 0 6 8120E+01	300	4000	8	5	õ	õ	0 0	Ő	69. cyc5h8oh-3	G 0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	0
20. 0011011	5 0 0.0120EF01	500	1000	0	5	0	v	0	0	70. cyc5h8o	G 0 8.4119E+01	300	1900	8	5	1	0	0	0

ELEMENTS ATOMIC CONSIDERED WEIGHT

71	C 0 9 2102E+01	200	1000	c	6	1	0	0	0	116. GD(30)	G	0 1.0713E+02	100	5000	7	7	1	0	0	0
72 boyo5b6o	C 0 9 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
72. DCyC51100	C 0 9 9151E+01	200	1900	12	5	1	0	0	0	118 GD (32)	G	0 7 9123E+01	100	5000	7	6	0	0	0	0
74 poptioh	C 0 9 9151E-01	200	5000	12	5	1	0	0	0	119 CD (22bic)	c	0 0 51668+01	100	5000	11	7	0	0	õ	0
75 pent2oh	G 0 8 8151E+01	200	3000	12	5	1	0	0	0	119. GD(22D13)	G	0 1 51005+01	100	5000	15	10	1	0	0	0
76 pro2oh	G 0 6 0097E+01	300	3000	8	3	1	0	0	0	120. 5(279)	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	Ő	0	0	121. S(660)	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	õ	Ō	Õ	122. S(376)	G	0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0
79. proloh	G 0 6.0097E+01	300	3000	8	3	1	0	0	0	123. S(306)	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	124. S(33)	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	125. S(721)	G	0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0
82. F2(11)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	126 5(260)	G	0 1 2318E+02	100	5000	11	8	1	0	0	0
83. F3(5)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	127 C0415(20)	c	0 1 23225+02	100	5000	15	9	<u>_</u>	0	0	0
84. F4(3)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	127. CSHIJ(38)	G	0 1.23226+02	100	5000	10	5	0	0	0	0
85. F5(9)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	128. (6H9(245)	G	0 8.11396+01	100	5000	9	0	0	0	0	0
86. F6(7)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	129. C/H/Om	G	0 1.0/13E+02	100	5000	/	/	Ţ	0	0	0
87. GD(1)	G 0 1.3620E+02	100	5000	12	9	1	0	0	0	130. C7H7Os	G	0 1.0713E+02	100	5000	7	7	1	0	0	0
88. GD(2)	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
89. GD(3)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	132. C9H15(392)	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	133. C3HO (1977)	G	0 5.3041E+01	100	5000	1	3	1	0	0	0
91. GD(5)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	134 (9415(41)	G	0 1 2322E+02	100	5000	15	à	0	0	0	0
92. GD(6)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	125 07000(502)	c	0 1 0014E102	100	5000	10	7	1	0	0	0
93. GD(7)	G 0 1.2318E+02	100	5000	11	8	1	0	0	0	135. C/ROU(303)	G	0 1.00146702	100	5000	0	/	1	0	0	0
94. GD(8)	G U 1.0814E+02	100	5000	11	/	1	0	0	0	130. 5(582)	G	0 1.2318E+02	100	5000	11	8	1	0	0	0
95. GD(9)	G 0 1.2318E+02	100	5000	11	8	1	0	0	0	137. S(2293)	G	0 5.4049E+01	100	5000	2	3	1	0	0	0
90. GD(10)	G 0 9.5100E+01	100	5000	15	,	0	0	0	0	138. S(312)	G	0 1.5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0
97. GD(11)	C 0 1 2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	139. S(677)	G	0 1.5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0
99 GD(13)	G 0 1 3620E+02	100	5000	12	9	1	0	0	0	140. ZS(1)	G	0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0
100. GD(14)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	Ő	0	Ő	141. ZS(2)	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	õ	õ	Ō	142 75(3)	G	0 1 5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0
102. GD(16)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	143 9(661)	c	0 1 51235+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	143. 3(001)	G	0 1.0120E+02	100	5000	10	10	1	0	0	0
104. GD(18)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	144. ZS(5)	G	U 1.362UE+U2	100	5000	12	9	1	0	0	0
105. GD(19)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	145. ZS(4)	G	0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0
106. GD(20)	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
107. GD(21)	G 0 8.1139E+01	100	5000	9	6	0	0	0	0	147. S(32)	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	148. S(566)	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	149 75(22)	G	0 1 3620E+02	100	5000	12	9	1	0	0	0
110. GD(24)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	150 dipco=24d	G	0 1 1016E+02	100	5000	10	7	1	0	õ	0
111. GD(25)	G 0 1.2318E+02	100	5000	11	8	1	0	0	0	150. dipco-24d	G	0 1.10106+02	100	5000	11	7	1	0	0	0
112. GD(26)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	151. uipco-204j	G	0 1.111/E+02	100	5000	11	10	1	0	0	0
113. GD(27)	G 0 8.1139E+01	100	5000	9	6	0	0	0	0	152. ZS(6)	G	U 1.5123E+02	100	5000	15	ΤÜ	1	0	0	0
114. GD(28)	G 0 1.0713E+02	100	5000	7	7	1	0	0	0	153. S(305)	G	0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0
115. GD(29)	G U 7.9123E+01	T00	5000	7	6	0	0	0	0	154. ZS(7)	G	0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0

155. ZS(8)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	213. S(574)	G 0 1.3620E+02	100	5000	12	9	1	0	0	C
156. ZS(9)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	214. S(573)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	C
157. ZS(10)	G 0 1.3620E+02	100	5000	12	9	1	0	0	0	215 S(311)	G 0 1 5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	Ċ
158 ZS (11)	G 0 1 3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	216 9(309)	C 0 1 5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0
159 ZS(12)	G 0 1 3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	217 9(579)	C 0 1 3620E+02	100	5000	12	10	1	0	0	6
160 79(13)	C 0 1 3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	217. 3(376)	G 0 1.5020E+02	100	5000	15	10	1	0	0	
161 aEb6 104d	G 0 1.5519E102	100	5000	C	5		0	0	0	218. 5(5/5)	G U 1.5123E+U2	100	5000	15	10	1	0	0	U.
161. CJH6=1240	G 0 0.0104ET01	100	5000	0	5	1	0	0	0	219. S(577)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	C
162. dipco-24dj	G U 1.0915E+02	100	5000	9	/	1	0	U	0	220. S(579)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	C
163. S(703)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	221. mcp2d	G 0 8.0131E+01	300	3000	8	6	0	0	0	C
164. S(224)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	222. toluen	G 0 9.2142E+01	200	6000	8	7	0	0	0	C
165. ZS(14)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	223. h	G 0 1.0080E+00	200	6000	1	0	0	0	0	C
166. ZS(15)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	224. o	G 0 1.5999E+01	200	6000	0	0	1	0	0	C
167. c5h8-12d3m	G 0 6.8120E+01	100	5000	8	5	0	0	0	0	225. oh	G 0 1.7007E+01	200	6000	1	0	1	0	0	C
168. ZS(16)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	226. ho2	G 0 3.3007E+01	200	5000	1	0	2	0	0	C
169. ZS(17)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	227. hco	G 0 2.9019E+01	298	3000	1	1	1	0	0	C
170. ZS(19)	G 0 1.3620E+02	100	5000	12	9	1	0	0	0	228 ch3	G 0 1 5035E+01	200	6000	3	1	0	0	0	Ċ
171. ZS(20)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	229 ch30	G 0 3 1034E+01	200	6000	3	1	1	0	Õ	Ċ
172. ZS(23)	G 0 1.2322E+02	100	5000	15	9	0	0	0	0	220. ch3o2	C 0 4 7034E+01	200	5000	3	1	2	0	0	6
173. ZS(24)	G 0 1.3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	221 0262	C 0 2 7046E+01	200	6000	2	2	0	0	0	0
174. ZS(25)	G 0 1.3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	231. C2113	G 0 2.7040E+01	200	6000	5	2	0	0	0	
175 c5h74v	G 0 6 7112E+01	100	5000	7	5	0	0	0	0	232. 0205	G U 2.9062E+UI	200	6000	5	2	0	0	0	U C
176 75(26)	G 0 1 3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	233. Ch3CO	G U 4.3U46E+U1	200	6000	3	2	1	0	0	U
177 78(27)	C 0 1 3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	234. pc4h9	G 0 5.7116E+01	200	6000	9	4	0	0	0	C
170 70(20)	G 0 1.3519E102	100	5000	11	9	1	0	0	0	235. chocho	G 0 5.8037E+01	300	5000	2	2	2	0	0	C
178. 25(28)	G 0 1.3519E+02	100	5000	11	9	1	0	0	0	236. nc3h7co	G 0 7.1100E+01	200	6000	7	4	1	0	0	C
1/9. ZS(29)	G U 1.0718E+U2	100	5000	11	8	0	0	0	0	237. ch2ocho	G 0 5.9045E+01	300	5000	3	2	2	0	0	C
180. ZS(30)	G U 1.0718E+U2	100	5000	11	8	0	0	0	0	238. ch3oco	G 0 5.9045E+01	300	5000	3	2	2	0	0	C
181. ZS(31)	G 0 1.0718E+02	100	5000	11	8	0	0	0	0	239. c3ket12	G 0 9.0079E+01	300	5000	6	3	3	0	0	C
182. ZS(32)	G 0 1.0718E+02	100	5000	11	8	0	0	0	0	240. c3ket13	G 0 9.0079E+01	300	5000	6	3	3	0	0	C
183. c5h7-12d5j	G 0 6.7112E+01	100	5000	7	5	0	0	0	0	241. c3ket21	G 0 9.0079E+01	300	5000	6	3	3	0	0	C
184. mcpmdsld	G 0 8.0131E+01	100	5000	8	6	0	0	0	0	242. c2h3coch3	G 0 7.0092E+01	300	5000	6	4	1	0	0	Ċ
185. mcptdsld	G 0 8.0131E+01	100	5000	8	6	0	0	0	0	243 sc3b5cbo	G 0 7 0092E+01	300	5000	6	4	1	0	0	Ċ
186. S(677bis)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	243. 3c3h5cho	C 0 7 0092E+01	300	5000	6	1	1	0	0	6
187. S(677all)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	244. aconocho 245. buttloob2*0	G 0 1 0411E+02	200	5000	0	4	2	0	0	
188. S(675)	G 0 1.5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0	245. but100112*0	G 0 1.0411E+02	200	5000	0	4	3	0	0	
189. S(822)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	246. Dut300h2^0	G 0 1.0411E+02	300	5000	8	4	3	0	0	U C
190. S(639)	G 0 1.5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0	247. but4ooh2*o	G 0 1.0411E+02	300	5000	8	4	3	0	0	C
191. S(313)	G 0 1.5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0	248. but2oohl*o	G 0 1.0411E+02	300	5000	8	4	3	0	0	C
192 \$(314)	G 0 1 5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0	249. but3oohl*o	G 0 1.0411E+02	300	5000	8	4	3	0	0	C
193 \$(315)	G 0 1 5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0	250. but4ooh1*o	G 0 1.0411E+02	300	5000	8	4	3	0	0	C
194 9(316)	C 0 1 5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0	251. c4h8cy1o3	G 0 7.2108E+01	300	4000	8	4	1	0	0	C
105 0(609)	C 0 1 1117E-02	100	5000	10	10	1	0	0	0	252. c4h8cylo4	G 0 7.2108E+01	300	4000	8	4	1	0	0	C
195. 5(090)	G 0 1.111/E+02	100	5000	12	<i>,</i>	1	0	0	0	253. c4h8cylo2	G 0 7.2108E+01	300	4000	8	4	1	0	0	C
196. 5(317)	G 0 1.3720E+02	100	5000	13	9	1	0	0	0	254. c4h8cy2o3	G 0 7.2108E+01	300	4000	8	4	1	0	0	C
197. 5(318)	G U 1.3720E+U2	100	5000	13	9	1	0	0	0	255. cvc5h8	G 0 6.8120E+01	200	6000	8	5	0	0	0	C
198. Fnone	G 0 1.5022E+02	100	5000	14	10	1	0	0	0	256, ch3cocho	G 0 7.2064E+01	300	5000	4	3	2	0	0	C
199. S(778)	G 0 1.3720E+02	100	5000	13	9	1	0	0	0	257 choch2cho	G 0 7 2064E+01	300	5000	4	3	2	0	0	Ċ
200. S(780)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	258 choc2b4cho	G 0 8 6091E+01	300	5000	6	4	2	0	Õ	Ċ
201. S(781)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	250. c10021140110	C 0 8 6001E+01	200	5000	e	-1	2	0	0	
202. S(381)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	259. C441030X0	G 0 0.0091E+01	200	5000	6	4	2	0	0	
203. S(782)	G 0 1.3720E+02	100	5000	13	9	1	0	0	0	260. C4ald20x0	G 0 8.6091E+01	200	5000	10	4	2	0	0	, L
204. S(310)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	261. hc3h/coch3	G U 8.6135E+U1	300	5000	10	5	1	0	0	U.
205. S(784)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	262. etcoc2h3	G U 8.4119E+01	300	5000	8	5	1	U	U	C
206. S(823)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	263. c2h5coch3	G 0 7.2108E+01	200	3000	8	4	T	U	U	C
207. S(824)	G 0 1.5123E+02	100	5000	15	10	1	0	0	0	264. c2h5coco	G 0 8.5083E+01	300	5000	5	4	2	0	0	C
208 \$(825)	G 0 1 5123E+02	100	5000	15	10	1	Ő	ů.	0	265. hccco	G 0 5.3041E+01	300	4000	1	3	1	0	0	C
209 \$(676)	G 0 1 5224F+02	100	5000	16	10	1	Ő	ů.	0	266. choch2co	G 0 7.1056E+01	300	5000	3	3	2	0	0	C
210 \$(653)	G 0 1 5224E+02	100	5000	16	10	1	0	0	0	267. ch2chchco	G 0 6.8076E+01	300	5000	4	4	1	0	0	C
211 0(654)	C 0 1 5224ETUZ	100	5000	16	10	1	0	0	0	268. cjhchchco	G 0 6.7068E+01	300	5000	3	4	1	0	0	C
212 0(590)	G U 1.J224E+U2	100	5000	10	10	1	0	0	0	269. nc4h9co	G 0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	Ċ
212. 5(380)	G U 1.3UZZE+UZ	TUU	5000	14	τU	T	U	U	U	270 c4h8co	G 0 8 4119E+01	300	5000	- 8	5	1	0	0	n
														<u> </u>	0	-	~	-	ç

071 417	a a a a1115.01	200	1000	-	~	-	~	0	0									
2/1. C4h/co	G U 8.3111E+U1	300	1900	/	5	1	0	0	0	220+	G 0 1 0310E.03	200 500	0 7	4	2	0	0	0
272. c4h6co	G 0 8.2103E+01	300	5000	6	5	1	0	0	0	329. acetoch202	G 0 1.0310E+02	300 500	0 7	4	3	0	0	0
273. c4h5co	G 0 8.1095E+01	300	4000	5	5	1	0	0	0	330. acetoch2o	G 0 8.7099E+01	300 500	0 7	4	2	0	0	0
274. choc2h4co	G 0 8.5083E+01	300	5000	5	4	2	0	0	0	331. c2h5coch2o	G 0 8.7099E+01	300 400	0 7	4	2	0	0	0
275. c4h8cho-5	G 0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	0	332. c6h13-1	G 0 8.5171E+01	300 500	0 13	6	0	0	0	0
276. c4h8cho-4	G 0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	0	333. ch2cco	G 0 5.4049E+01	300 500	0 2	3	1	0	0	0
277 c4h8cho=3	G 0 8 5127E±01	300	5000	9	5	1	0	0	0	334. hoch2o	G 0 4.7034E+01	300 600	0 3	1	2	0	0	0
278 c4b8cbo=2	G 0 8 5127E+01	300	5000	à	5	1	Õ	0	0	335. hocho	G 0 4.6026E+01	300 500	0 2	1	2	0	0	0
270. c4110cho-2	G 0 0.01547.01	200	5000	11	5	1	0	0	0	336 c6b1015	G 0 8 2147E+01	300 300	0 10	6	0	0	0	0
2/9. C5h10ch0-6	G U 9.9154E+U1	300	5000	11	6	1	0	0	0	337 ch3coob	G 0 6 0053E+01	300 190	0 4	2	2	0	0	0
280. CShiUcho-5	G U 9.9154E+UI	300	5000	11	6	1	0	0	0	220 haash	G 0 0.00005E+01	200 200	0 1	1	2	0	0	
281. c5h10cho-4	G 0 9.9154E+01	300	5000	11	6	1	0	0	0	338. ncoon	G U 4.6026E+UI	298 300	0 2	1	2	0	0	0
282. c5h10cho-3	G 0 9.9154E+01	300	5000	11	6	1	0	0	0	339. C6N13-2	G U 8.51/1E+U1	300 500	0 13	6	0	0	0	0
283. c2h3oh	G 0 4.4054E+01	300	5000	4	2	1	0	0	0	340. c6h13-3	G 0 8.5171E+01	300 500	0 13	6	0	0	0	0
284. ch3cococh3	G 0 8.6091E+01	300	3000	6	4	2	0	0	0	341. hex3o2	G 0 1.1717E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
285 c3b6o1-2	G 0 5 8081E±01	200	6000	6	3	1	0	0	0	342. hex4o2h2j	G 0 1.1717E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
286 c5h10cho-2	C 0 0 0154E+01	300	5000	11	6	1	õ	0	0	343. hex4o2h2o2	G 0 1.4917E+02	300 400	0 13	6	4	0	0	0
200. C5H10CH0-2	G 0 9.9154E101	200	5000	11	6	1	0	0	0	344. hexlo	G 0 1.0117E+02	300 400	0 13	6	1	0	0	0
287. C5h11C0	G U 9.9154E+U1	300	5000	11	6	1	0	0	0	345 bex20	G 0 1 0117E+02	300 400	0 13	6	1	0	0	0
288. C5h11-1	G 0 7.1143E+01	300	5000	11	5	0	0	0	0	346 box30	C 0 1 0117E+02	300 400	0 13	6	1	0	0	0
289. c5h11-2	G 0 7.1143E+01	300	5000	11	5	0	0	0	0	247 hav1-0h4-	G 0 1.0117E102	200 400	0 10	0	1	0	0	0
290. c5h11-3	G 0 7.1143E+01	300	5000	11	5	0	0	0	0	347. nex102n4j	G 0 1.1/1/E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
291. pent1o2	G 0 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	348. nex202n5j	G U 1.1/1/E+U2	300 400	0 13	6	2	0	0	0
292. pent2o2	G 0 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	349. hex1o2h4o2	G 0 1.4917E+02	300 400	0 13	6	4	0	0	0
293 pent302	G 0 1 0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	350. hex2o2h5o2	G 0 1.4917E+02	300 400	0 13	6	4	0	0	0
294 pont1o2h2i	C 0 1 0314E+02	300	5000	11	5	2	õ	0	0	351. hex1o2	G 0 1.1717E+02	300 500	0 13	6	2	0	0	0
204. pencioznizj	G 0 1.0314E+02	200	5000	11	5	2	0	0	0	352. hex2o2	G 0 1.1717E+02	300 500	0 13	6	2	0	0	0
295. pentioznaj	G U 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	353. hex1o2h3i	G 0 1.1717E+02	300 500	0 13	6	2	0	0	0
296. pentlo2h4j	G 0 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	354 hex2o2h4i	G 0 1 1717E+02	300 500	0 13	6	2	0	0	0
297. pentlo2h5j	G 0 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	255 how1o2h2o2	C 0 1 4017E+02	200 500	0 12	ć	4	0	0	0
298. pent2o2h1j	G 0 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	355. Hexto2H302	G 0 1.4917E+02	200 500	0 13	6	4	0	0	0
299. pent2o2h3j	G 0 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	356. nex202n402	G U 1.491/E+U2	300 500	0 13	6	4	0	0	0
300. pent2o2h4j	G 0 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	357. prcoch3-3	G 0 8.5127E+01	100 500	0 9	5	1	0	0	0
301 pent2o2h5i	G 0 1 0314E±02	300	5000	11	5	2	0	0	0	358. c6h5oh	G 0 9.4114E+01	300 300	0 6	6	1	0	0	0
302 pent3o2h1i	G 0 1 0314E+02	300	5000	11	5	2	Õ	0	0	359. phco	G 0 1.0512E+02	300 500	0 5	7	1	0	0	0
202. penesoznij	G 0 1 0314E+02	200	5000	11	5	2	0	0	0	360. c5h4o	G 0 8.0087E+01	300 600	0 4	5	1	0	0	0
303. pent302n2j	G U 1.0314E+02	300	5000	11	5	2	0	0	0	361. c4h7cho-4	G 0 8.4119E+01	300 500	0 8	5	1	0	0	0
304. pentlo2h	G 0 1.0415E+02	300	5000	12	5	2	0	0	0	362, prcoch2o2	G 0 1.1713E+02	300 500	0 9	5	3	0	0	0
305. pent2o2h	G 0 1.0415E+02	300	5000	12	5	2	0	0	0	363 preoch2o	G 0 1 0113E+02	300 500	0 9	5	2	0	0	0
306. pent3o2h	G 0 1.0415E+02	300	5000	12	5	2	0	0	0	364 ch3cohch	C 0 5 7073E+01	300 500	0 5	3	1	0	0	0
307. c5h913	G 0 6.9127E+01	300	5000	9	5	0	0	0	0	265 pro2ohld	C 0 5 0001E101	200 500	0 5	2	1	0	0	0
308. c5h924	G 0 6.9127E+01	300	5000	9	5	0	0	0	0	Ses. prozonitu	G U 5.8081E+01	300 500	0 0	3	1	0	0	0
309. c5h914	G 0 6.9127E+01	300	4000	9	5	0	0	0	0	366. C6h1126	G 0 8.3155E+01	300 500	0 11	6	0	0	0	0
310 pentovlo2	G 0 8 6135E±01	300	5000	10	5	1	0	0	0	367. c6h1125	G 0 8.3155E+01	300 500	0 11	6	0	0	0	0
211 pontovio2	C 0 9 612552101	200	5000	10	5	1	0	0	0	368. c6h1116	G 0 8.3155E+01	300 500	0 11	6	0	0	0	0
210 penteyios	G 0 0.0135E101	200	5000	10	5	1	0	0	0	369. c6h1115	G 0 8.3155E+01	300 500	0 11	6	0	0	0	0
312. pentcy104	G U 8.6135E+U1	300	5000	10	5	1	0	0	0	370. tc4h8oh	G 0 7.3116E+01	300 500	0 9	4	1	0	0	0
313. pentcylo5	G 0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	0	371, but2m2oh3d	G 0 8.6135E+01	300 500	0 10	5	1	0	0	0
314. pentcy2o3	G 0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	0	372 but2m=2	G 0 7 1143E+01	300 500	0 11	5	0	0	0	0
315. pentcy2o4	G 0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	0	373 g6b1114	C 0 9 3155E+01	300 500	0 11	6	õ	0	0	0
316. pentlo	G 0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	0	274 - (1112	G 0 0.3155E101	200 500	0 11	0	0	0	0	0
317. pent2o	G 0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	0	374. CONTITS	G U 8.3155E+U1	300 500	0 11	6	0	0	0	0
318 pent30	G 0 8 7143E+01	300	5000	11	5	1	Õ	0	0	375. hex1o2h2j	G 0 1.1717E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
210	G 0 1 0010E+02	200	5000	11	5	-	0	0	0	376. hex2o2h3j	G 0 1.1717E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
319. Choc3h6cho	G U 1.0012E+02	300	5000	8	5	2	0	0	0	377. hex3o2h2j	G 0 1.1717E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
32U. CSald40x0	G U 1.0012E+02	300	5000	8	5	2	0	0	0	378. hex3o2h4j	G 0 1.1717E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
321. c5ald3oxo	G 0 1.0012E+02	300	5000	8	5	2	0	0	0	379. hex1o2h2o2	G 0 1.4917E+02	300 400	0 13	6	4	0	0	0
322. pent3oh-1	G 0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	0	380. hex2o2h3o2	G 0 1.4917E+02	300 400	0 13	6	4	0	Ó	ñ
323. pent3oh-2	G 0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	0	381 hex302h202	G 0 1 4917E+02	300 400	0 13	6	4	õ	Ő	0
324. pent3oh-3	G 0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	0	202 how2o2h4-2	C 0 1 40170-02	200 400	0 10	G	7	0	0	0
325. c5ald2oxo	G 0 1.0012E+02	200	6000	8	5	2	0	0	0	302. nex302n402	G U 1.491/E+U2	300 400	0 13	0	4	U	0	0
326 mecoetco	G 0 9 9110E±01	300	5000	7	5	2	õ	õ	õ	383. nex402nij	G U 1.1/1/E+02	300 400	U 13	6	2	U	U	0
227 at amaga	C 0 0 01100-01	200	5000	7	5	2	0	0	0	384. hex4o2hlo2	G 0 1.4917E+02	300 400	υ 13	6	4	0	0	0
327. etcomeco	G U 9.9110E+UI	300	5000	/	5	2	U	U	U	385. hex2o2h1j	G 0 1.1717E+02	300 400	0 13	6	2	0	0	0
328. prcoco	G 0 9.9IIOE+01	200	6000	/	5	2	U	U	U	386. hex2o2h1o2	G 0 1.4917E+02	300 400	0 13	6	4	0	0	0

387. h	ex2o2h1*o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	445 cvc5b9o	G	0 8 51278+01	300	5000	9	5	1	0	0	0
388. h	ex3o2h1*o	G	0 1.3216E+02	300	5000	12	6	3	0	0	0	446 symtaloh	c	0 0.0110001	200	5000	0	5	1	0	0	0
389 0	6h1124	G	0 8 3155E+01	300	5000	11	6	0	0	õ	ő	446. Cypthion	G	0 8.4119E+01	200	5000	8	5	1	0	0	0
300 h	ov1o2b1*o	ć	0 1 32168+02	300	4000	12	6	3	0	0	Ő	447. Cypthzon	G	0 8.41196+01	300	5000	8	5	1	0	0	0
201 h	ex402h1 0	G	0 1 2216E102	200	4000	10	6	2	0	0	0	448. cyptn3oh	G	0 8.4119E+01	300	5000	8	5	1	0	0	0
202 h	exJ02111.0	G	0 1.3210E+02	200	4000	12	0	2	0	0	0	449. ch2choo	G	0 5.9045E+01	298	3000	3	2	2	0	0	0
392. 1	exioznz^o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	0	3	0	0	0	450. ic4h9	G	0 5.7116E+01	300	5000	9	4	0	0	0	0
393. n	ex302n2*0	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	451. ic4h7	G	0 5.5100E+01	300	5000	7	4	0	0	0	0
394. h	ex4o2h2*o	G	0 1.3216E+02	300	5000	12	6	3	0	0	0	452. tc4h9	G	0 5.7116E+01	300	5000	9	4	0	0	0	0
395. h	ex5o2h2*o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	453. ic3h7co	G	0 7.1100E+01	300	3000	7	4	1	0	0	0
396. h	ex2o2h3*o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	454. ic4h8io2h	G	0 8.9115E+01	300	4000	9	4	2	0	0	0
397. h	ex4o2h3*o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	455. ho2ic4h7io	G	0 1.0411E+02	300	4000	8	4	3	0	0	0
398. h	ex1o2h4*o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	456 ic4b9o2	G	0 8 9115E+01	300	5000	9	4	2	0	0	Ő
399. h	ex2o2h4*o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	457 tc3b6cbo	Ğ	0 7 1100E+01	300	3000	7	4	1	0	0	Ő
400 h	ex1o2h	G	0 1 1818E+02	300	4000	1.4	6	2	0	0	0	459 ig3b5co	ć	0 6 909/E+01	300	5000	5	4	1	0	0	0
401 h	ev2o2h	Ğ	0 1 18185+02	300	4000	1.4	6	2	0	Õ	Ő	450. 1050500	G	0 0.0004101	200	5000	5	-	1	0	0	0
401. h	ow2o2h	c	0 1 10100102	200	4000	1.4	G	2	0	0	0	459. 1Sopy	G	0 6./112E+01	298	5000	/	5	0	0	0	0
402. 11	Ch1121	G	0 0.01555.01	200	4000	11	0	2	0	0	0	460. but3mlat	G	0 6.912/E+01	300	4000	9	5	0	0	0	0
403. C	6n1131	G	0 8.3155E+01	300	5000	11	6	0	0	0	0	461. tc4h8io2h	G	0 8.9115E+01	300	4000	9	4	2	0	0	0
404. c	6h1013	G	0 8.2147E+01	300	5000	10	6	0	0	0	0	462. ho2tc4h7io	G	0 1.0411E+02	300	4000	8	4	3	0	0	0
405. h	ex1o2h5j	G	0 1.1717E+02	300	4000	13	6	2	0	0	0	463. ch2cch2oh	G	0 5.7073E+01	300	5000	5	3	1	0	0	0
406. h	ex1o2h5o2	G	0 1.4917E+02	300	4000	13	6	4	0	0	0	464. ic4h8o	G	0 7.2108E+01	300	5000	8	4	1	0	0	0
407. h	ex3o2h1j	G	0 1.1717E+02	300	4000	13	6	2	0	0	0	465. ic4h8oh	G	0 7.3116E+01	300	5000	9	4	1	0	0	0
408. h	ex3o2h1o2	G	0 1.4917E+02	300	4000	13	6	4	0	0	0	466. ic4h7o	G	0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	0
409. h	ex1o2h3*o	G	0 1.3216E+02	300	4000	12	6	3	0	0	0	467. ic4h7ooh	G	0 8.8107E+01	300	5000	8	4	2	0	0	0
410. C	6h12co	G	0 1.1217E+02	300	5000	12	7	1	0	0	0	468 ic4h7oh	G	0 7 2108E+01	300	5000	8	4	1	0	0	Ő
411 c	6h10co	G	0 1 1016E+02	300	5000	10	7	1	0	Õ	Ő	469 ic4b9o2b	G	0 9 0123E+01	300	5000	10	4	2	0	0	ő
412 b	u+2m2ch 1	c	0 0 71/20101	200	2000	11	5	1	0	0	0	470 ic4h9c	ć	0 7 21160101	200	5000	10	4	1	0	0	0
412. D	ut2m2on=1	G	0 0.71435+01	200	3000	11	5	1	0	0	0	470. 1041190	G	0 7.31106+01	200	1000	9	4	1	0	0	0
413. D	utzmzon-3	G	0 8.7143E+01	200	3000	11	5	1	0	0	0	4/1. 1C4n8to2n	G	0 8.9115E+01	300	4000	9	4	2	0	0	0
414. b	ut2m2oh-4	G	0 8.7143E+01	200	3000	11	5	1	0	0	0	472. but3mldp	G	0 6.9127E+01	300	4000	9	5	0	0	0	0
415. m	ecoprco	G	0 1.1314E+02	300	5000	9	6	2	0	0	0	473. c6h5	G	0 7.7107E+01	200	6000	5	6	0	0	0	0
416. e	tcoetco	G	0 1.1314E+02	300	5000	9	6	2	0	0	0	474. Mc6h6	G	0 7.8115E+01	300	5000	6	6	0	0	0	0
417. p	rcomeco	G	0 1.1314E+02	300	5000	9	6	2	0	0	0	475. c6h7c	G	0 7.9123E+01	300	5000	7	6	0	0	0	0
418. c	4h9cocho	G	0 1.1415E+02	300	5000	10	6	2	0	0	0	476. HEX1245	G	0 7.8115E+01	200	6000	6	6	0	0	0	0
419. C	4h9coco	G	0 1.1314E+02	300	5000	9	6	2	0	0	0	477. FULVENE	G	0 7.8115E+01	200	6000	6	6	0	0	0	0
420 n	rcoch3-1o	G	0 1 0113E+02	300	5000	9	5	2	0	0	0	478, c6h5o	G	0 9.3106E+01	200	6000	5	6	1	0	0	0
421 b	2000.00 10	ć	0 4 50192+01	200	3000	1	1	2	0	0	Ő	479 c5b5	Ğ	0 6 5096E+01	300	3000	5	5	0	0	0	Ő
421. 10	45722	G	0 5 51000101	200	5000	-	1	2	0	0	0	490 c6b615	ć	0 7 91158+01	200	6000	6	6	0	0	0	0
422. 0	411/22	G	0 7.01257.01	200	4000	10		0	0	0	0	400. CONVIS	G	0 1 06120102	200	5000	G	7	1	0	0	0
423. D	utsmia	G	0 /.0135E+01	300	4000	10	5	0	0	0	0	481. phnco	G	0 1.0613E+02	300	5000	0	,	1	0	0	0
424. c	4h/loohld	G	0 8.810/E+01	200	6000	8	4	2	0	0	0	482. cyc5n9	G	0 6.912/E+01	200	6000	9	5	0	0	0	0
425. c	4h7looh2d	G	0 8.8107E+01	200	6000	8	4	2	0	0	0	483. cyc5h7	G	0 6.7112E+01	200	6000	1	5	0	0	0	0
426. c	4h7looh3d	G	0 8.8107E+01	200	6000	8	4	2	0	0	0	484. lc5h5	G	0 6.5096E+01	300	5000	5	5	0	0	0	0
427. c	4h72ooh1d	G	0 8.8107E+01	200	6000	8	4	2	0	0	0	485. cc6h813	G	0 8.0131E+01	300	3000	8	6	0	0	0	0
428. c	4h72ooh2d	G	0 8.8107E+01	200	6000	8	4	2	0	0	0	486. c2o	G	0 4.0022E+01	300	5000	0	2	1	0	0	0
429. c	4h72ooh3d	G	0 8.8107E+01	200	6000	8	4	2	0	0	0	487. but2m1d3	G	0 6.9127E+01	300	5000	9	5	0	0	0	0
430 C	h2cooh	G	0 5 9045E+01	300	1900	3	2	2	0	0	0	488. tc5h11	G	0 7.1143E+01	300	5000	11	5	0	0	0	0
431 C	5h5o13	G	0 8 1095E+01	200	6000	5	5	1	0	Õ	Ő	489. c4h91o2	G	0 8,9115E+01	300	5000	9	4	2	0	0	0
431.0	blachab	G	0 6.100000101	200	5000	5	2	1	0	0	0	490 c4b81oob2i	G	0 8 9115E+01	300	5000	9	4	2	õ	0	ő
432.0		G	0 0.110/36+01	300	5000	5	3	1	0	0	0	491 c/h91och1i	ć	0 9 91158+01	300	5000	9	1	2	0	0	ő
433. p	hch2	G	0 9.1134E+01	200	6000	1	/	0	0	0	0	491. C4118100111]	G	0 0.911100	200	5000	9	4	2	0	0	0
434. p	hch2oh	G	0 1.0814E+02	300	5000	8	1	1	0	0	0	492. DUCIOON202	G	0 1.2111E+02	200	5000	9	4	4	0	0	0
435. p	hch2o	G	0 1.0713E+02	300	3000	7	7	1	0	0	0	493. Dutloon302	G	0 1.2111E+02	300	5000	9	4	4	0	0	0
436. a	cyc5h7o	G	0 8.3111E+01	300	1900	7	5	1	0	0	0	494. butlooh4o2	G	0 1.2111E+02	300	5000	9	4	4	0	0	0
437. b	cyc5h7o	G	0 8.3111E+01	300	1900	7	5	1	0	0	0	495. c4h9lo2h	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	496. pc4h9o	G	0 7.3116E+01	300	5000	9	4	1	0	0	0
439. b	-acvc5h5o	G	0 8.1095E+01	300	2000	5	5	1	0	0	0	497. c4h92o2	G	0 8.9115E+01	300	5000	9	4	2	0	0	0
440 0	5h5ooh	G	0 9 8102E+01	100	5000	6	5	2	0	0	õ	498. c4h82ooh1j	G	0 8.9115E+01	300	5000	9	4	2	0	0	0
441 0	5h5ob	G	0 8 2103E+01	300	5000	6	5	- 1	0	0	0	499. c4h82ooh2j	G	0 8.9115E+01	300	5000	9	4	2	0	0	0
1/12 I	25550	G	0 0 10052101	300	5000	5	5	1	0	0	0	500, c4h82ooh3i	G	0 8.9115E+01	300	5000	9	4	2	0	0	0
142. I	conou bebebe	G	0 0.10935701	200	5000	2	3	1	0	0	0	501. c4h82ooh4i	G	0 8.9115E+01	300	5000	9	4	2	0	0	õ
443. C	neneno	G	U 5.5U5/E+01	300	5000	3	3	1	U	U	U	502 but200b102	ć	0 1 21115402	300	5000	à	-1	-	0	0	õ
444. c	5h30	G	U /.9079E+01	300	3500	3	5	1	0	U	0	JUZ. DULZOUHIUZ	G	0 1.21116702	200	5000	7	12	-1	v	U	U

503. but2ooh3o2	G 0 1.2111E+02	300	5000	9	4	4	0	0	0										
504. but2ooh4o2	G 0 1.2111E+02	300	5000	9	4	4	0	0	0										
505. c4h92o2h	G 0 9.0123E+01	300	5000	10	4	2	Ő	0	õ	561. c3h5-s	G 0 4.1073E+01	298	3000	5	3	0	0	0	0
506 sc4b90	G 0 7 3116E+01	300	5000	9	4	1	0	0	0	562. c3h5-t	G 0 4.1073E+01	298	3000	5	3	0	0	0	0
507 c4i3ooh2*o	G 0 1 0310E+02	300	5000	7	4	3	Ő	õ	0	563. hoc4h6	G 0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	0
508 c43002*0	G 0 1 0310E+02	300	5000	7	4	2 2	Ő	õ	0	564. c3h3	G 0 3.9057E+01	200	6000	3	3	0	0	0	0
500. c43002 0	G 0 7.1100E.01	200	5000	7	4	1	0	0	0	565. c3h2	G 0 3.8049E+01	300	5000	2	3	0	0	0	0
509. Chischeochis	G 0 7.1100E+01	200	5000	1	1	1	0	0	0	566. c4h712	G 0 5.5100E+01	300	5000	7	4	0	0	0	0
510. Ch3ChCo	G U 5.6065E+01	300	5000	4	3	1	0	0	0	567. hco3	G 0 6.1017E+01	300	5000	1	1	3	0	0	0
511. C3n6cno-2	G U 7.1100E+01	300	5000	/	4	1	0	0	0	568, ch2(s)	G 0 1.4027E+01	200	6000	2	1	0	0	0	0
512. c3h6cho-3	G 0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	0	569 c4b6o2b	G 0 8 7099E+01	300	5000	7	4	2	0	0	0
513. sc4h8oh-1	G 0 7.3116E+01	300	3000	9	4	1	0	0	0	570 pro20b=1	C 0 5 9099E+01	200	3000	7	3	1	0	0	0
514. acetoo2	G 0 8.9072E+01	300	5000	5	3	3	0	0	0	570. prozon-1	G 0 5.9009E101	200	6000	e la	2	1	0	0	0
515. acetoo	G 0 7.3072E+01	300	5000	5	3	2	0	0	0	571. protonzu	G 0 J.8081E+01	200	2000	1	1	1	0	0	0
516. c3h6cho-4o	G 0 8.7099E+01	300	4000	7	4	2	0	0	0	572. ncoz	G 0 4.5018E+01	298	3000	11	1 C	2	0	0	0
517. c5h7	G 0 6.7112E+01	200	6000	7	5	0	0	0	0	575. pentzmids	G U 8.3133E+UI	300	5000	11	0	0	0	0	0
518. nc3h7	G 0 4.3089E+01	200	6000	7	3	0	0	0	0	5/4. C6N9143	G U 8.1139E+UI	300	5000	9	6	0	0	0	0
519. c2h	G 0 2.5030E+01	200	6000	1	2	0	0	0	0	5/5. acetoch2	G 0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	0
520. ch3coch2	G 0 5.7073E+01	200	6000	5	3	1	0	0	0	576. c2h5coch2	G 0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	0
521. ch2oh	G 0 3.1034E+01	200	6000	3	1	1	0	0	0	577. proloh-2	G 0 5.9089E+01	298	3000	7	3	1	0	0	0
522 bcco	G 0 4 1030E+01	200	6000	1	2	1	0	0	0	578. c3h6loh2oo	G 0 9.1087E+01	300	3000	7	3	3	0	0	0
522. neco	G 0 5 5100E+01	300	5000	7	4	<u>_</u>	0	0	0	579. c3h62oh1oo	G 0 9.1087E+01	300	3000	7	3	3	0	0	0
520. C411/11	C 0 4 5062E+01	200	6000	5	2	1	0	0	0	580. pc4h8oh-1	G 0 7.3116E+01	300	3000	9	4	1	0	0	0
524. pcznietni 525. odboloch24	C 0 9 0115F101	200	5000	0	4	2	0	0	0	581. o2c2h4oh	G 0 7.7060E+01	300	5000	5	2	3	0	0	0
525. C40810003	G U 8.9115E+U1	300	5000	9	4	2	0	0	0	582. pc4h8oh-2	G 0 7.3116E+01	300	3000	9	4	1	0	0	0
526. Ch2Ch0	G U 4.3U46E+U1	200	6000	3	2	1	0	0	0	583, pc4h8oh-3	G 0 7.3116E+01	300	3000	9	4	1	0	0	0
527. pent2mld	G 0 8.4163E+01	300	3000	12	6	0	0	0	0	584 pc4h8ob-4	G 0 7 3116E+01	300	3000	9	4	1	0	0	0
528. pent3mld	G 0 8.4163E+01	300	3000	12	6	0	0	0	0	585 ch	G 0 1 3019E+01	300	5000	1	1	0	0	0	0
529. pent4mld	G 0 8.4163E+01	300	3000	12	6	0	0	0	0	586 bco3b	C 0 6 2025E+01	300	5000	2	1	3	0	0	0
530. c4h5o	G 0 6.9084E+01	300	5000	5	4	1	0	0	0	500. IICOSII 507. och0152	G 0 0.2023E101	200	2000	2	É É	0	0	0	0
531. c6h9146	G 0 8.1139E+01	300	3000	9	6	0	0	0	0	500 ==25(=b 2	G 0 8.1139E+01	200	3000	3	0	1	0	0	0
532. c6h9156	G 0 8.1139E+01	300	3000	9	6	0	0	0	0	588. nc5n60n-5	G 0 5.9089E+01	200	5000	1	3	1	0	0	0
533. ic3h7	G 0 4.3089E+01	200	6000	7	3	Ō	0	Ō	0	589. c2h5chco	G 0 7.0092E+01	300	5000	6	4	1	0	0	0
534. c2h5co	G 0 5.7073E+01	200	6000	5	3	1	0	0	0	590. ch3chocho	G 0 7.3072E+01	300	5000	5	3	2	0	0	0
535 c2h5c2	G 0 6 1061E+01	200	6000	5	2	2	0	0	0	591. ch3chcho	G 0 5.7073E+01	300	5000	5	3	1	0	0	0
536 ch3o2h	G 0 4 8042E+01	200	6000	4	1	2	Ő	õ	0	592. sc3h5co	G 0 6.9084E+01	300	5000	5	4	1	0	0	0
537 c2b5o2b	G 0 6 2069E+01	300	5000	6	2	2	0	0	0	593. ic3h6cho	G 0 7.1100E+01	300	3000	7	4	1	0	0	0
539 c2h3o1 2	C 0 4 3046E+01	300	5000	3	2	1	0	0	0	594. c3h6cho-4	G 0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	0
530. c2li301,2	G 0 4.3040EF01	200	1000	2	2	1	0	0	0	595. sc4h8oh-3	G 0 7.3116E+01	300	3000	9	4	1	0	0	0
539. 013002	G U 5.9045E+01	300	1900	3	2	2	0	0	0	596. ic4h5	G 0 5.3084E+01	300	5000	5	4	0	0	0	0
54U. C2n4o2n	G U 6.1061E+01	300	5000	5	2	2	0	0	0	597. nc4h5	G 0 5.3084E+01	200	6000	5	4	0	0	0	0
541. ch3co3	G 0 7.5044E+01	300	5000	3	2	3	0	0	0	598 ac3h5co	G 0 6 9084E+01	300	5000	5	4	1	0	0	0
542. ch3co3h	G 0 7.6052E+01	300	5000	4	2	3	0	0	0	599 c2h3chcho	G 0 6 9084E+01	300	5000	5	4	1	0	0	0
543. c2h3co	G 0 5.5057E+01	200	6000	3	3	1	0	0	0	600 ic4b3	G 0 5 1069E+01	300	5000	3	4	<u>_</u>	0	0	0
544. choco	G 0 5.7029E+01	300	5000	1	2	2	0	0	0	601 c2h3choch2	C 0 7 0092E+01	300	3000	6	1	1	0	0	0
545. c3h5o	G 0 5.7073E+01	298	3000	5	3	1	0	0	0	602 a6b9125	G 0 7.0052E101	200	2000	0	4	1	0	0	0
546. prooh1-2	G 0 7.5088E+01	298	5000	7	3	2	0	0	0	602. C0110133	G 0 8.0131E+01	200	5000	0	0	0	0	0	0
547. prooh1-3	G 0 7.5088E+01	298	5000	7	3	2	0	0	0	603. nc4n3	G U 5.1069E+UI	300	5000	3	4	0	0	0	0
548. prooh2-1	G 0 7.5088E+01	298	5000	7	3	2	0	Ō	0	604. c4h	G 0 4.9053E+01	300	5000	1	4	0	0	0	0
549. prooh1-2o2	G 0 1.0709E+02	300	5000	7	3	4	0	0	0	605. h2c4o	G 0 6.6060E+01	300	5000	2	4	1	0	0	0
550, proch1-3c2	G 0 1.0709E+02	300	5000	7	3	4	0	0	0	606. ch3choh	G 0 4.5062E+01	300	5000	5	2	1	0	0	0
551 prooh2=1o2	G 0 1 0709E+02	300	5000	7	3	4	0	0	0	607. h2cccch2	G 0 5.2076E+01	300	5000	4	4	0	0	0	0
551. proonz 102	C 0 5 0080E+01	200	3000	7	3	1	0	0	0	608. c5h4oh	G 0 8.1095E+01	200	6000	5	5	1	0	0	0
552. ic3h7c	G 0 5.9009E101	200	2000	7	2	1	0	0	0	609. etcoeto	G 0 1.0113E+02	300	5000	9	5	2	0	0	0
555. 1051170	G 0 3.9089E+01	2.90	5000	/	2	1	0	0	0	610. ch3ccch2	G 0 5.3084E+01	300	5000	5	4	0	0	0	0
554. nc3n702n	G U 7.6096E+01	300	5000	8	2	2	0	0	0	611. c4h713	G 0 5.5100E+01	200	6000	7	4	0	0	0	0
555. 1c3h/o2h	G U 7.6096E+01	300	5000	8	3	2	0	0	0	612. ch3chcch	G 0 5.3084E+01	300	5000	5	4	0	0	0	0
556. nc3h7o2	G 0 7.5088E+01	298	5000	7	3	2	U	Ű	0	613. c3h3o	G 0 5.5057E+01	200	5000	3	3	1	Ó	0	0
557. ic3h7o2	G 0 7.5088E+01	298	5000	7	3	2	0	0	0	614 c4b714	G 0 5 5100F+01	200	6000	7	4	0	Ő	Ő	0
558. c3h6o1-3	G 0 5.8081E+01	300	5000	6	3	1	0	0	0	615 b2o2 (w)	C 0 3 40158+01	200	6000	2	0	2	Ő	0	0 0
559. sc4h9	G 0 5.7116E+01	200	6000	9	4	0	0	0	0	616 c/b91och45	C 0 9 91155101	200	5000	4	4	2	0	0	0
560. c3h5-a	G 0 4.1073E+01	298	5000	5	3	0	0	0	0	617 ch2chchch	C 0 5 70735-01	200	3000	5	3	∠ 1	0	0	0
										cio -254-	G U 5./U/3E+UI	290	5000	5	3	1	0	U	0
										010. C3H40	G U 3.0003E+01	200	2000	4	3	1	U	U	U

619 a3h4a2h	C 0 7 307	201	300 5	000	5	3 /	>	0	0	0						_					
019. 03140211	G 0 7.307	20101	500 5	000	5		-	0	0	0	677. mp2j	G	0 8.7099E+01	300	5000	7	4	2	0	0	
620. CZNZON	G U 4.304	0E+01	300 5	000	3	2		0	0	0	678. but2m-3	G	0 7.1143E+01	200	6000	11	5	0	0	0	(
621. hccoh	G 0 4.203	8E+01	300 4	000	2	2 1		0	0	0	679. but2m-1	G	0 7.1143E+01	200	6000	11	5	0	0	0	(
622. ch3ch2o	G 0 4.506	2E+01	300 5	000	5	2 1		0	0	0	690 cuptplob-1	ĉ	0 9 31115+01	300	5000		5	1	0	0	
623 c4h5-2	G 0 5 308	4E+01	300 3	000	5	4 ()	0	0	0	col cypeniton-i	G	0 0.01110101	200	5000	7	5	1	0	0	
62.0. ohio 2	G 0 7 105	CD 101	200 5	000	2	2 1		0	0	0	681. Cyptnion-2	G	0 8.3111E+01	300	5000	/	5	1	0	0	
624. CH3COCO	G U 7.105	06E+U1	300 3	000	3	3 4	<u> </u>	0	0	0	682. cyptn2oh-1	G	0 8.3111E+01	300	5000	7	5	1	0	0	(
625. mecomeco	G 0 8.508	3E+01	300 5	000	5	4 2	2	0	0	0	683. but2oh1d	G	0 7.2108E+01	200	3000	8	4	1	0	0	(
626. choc3h6co	G 0 9.911	.0E+01	300 5	000	7	5 2	2	0	0	0	684 but2ob2d	G	0 7 2108E+01	200	3000	8	4	1	0	0	
627. c2	G 0 2.402	2E+01	300 5	000	0	2 ()	0	0	0	695 pontlob-1	č	0 9 71/35+01	300	5000	11	5	1	0	õ	, i
628 c4b6c25	C 0 7 009	201	200 5	000	6	4		0	0	0	oos. pencion-i	9	0 0.71451101	500	5000	11	5	±	0	0	
020. 04110025	G 0 7.009	20101	200 .	000	0	4 -	-	0	0	0	686. pentloh-2	G	0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	(
629. C4N6023	G 0 7.009	2E+01	200 3	000	0	4		0	0	0	687. pentloh-3	G	0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	(
630. h2cc	G 0 2.603	8E+01	200 6	000	2	2 ()	0	0	0	688. pentloh-4	G	0 8.7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	(
631. ic3h6co	G 0 7.009	2E+01	300 5	000	6	4 1		0	0	0	689 pentloh-5	G	0 8 7143E+01	300	5000	11	5	1	0	0	(
632. ch2	G 0 1.402	7E+01	200 6	000	2	1 ()	0	0	0	600 pentionial	- -	0 0 61250101	200	5000	10	5	1	0	0	2
622 0	C 0 1 201	101	200 6	000	0	1 (0	0	0	690. pencientor	G	0 8.01336+01	300	5000	10	5	1	0	0	
655. 0	G U 1.201	ILTUI	300 .	000	0	1 ()	0	0	0	691. pent2enlol	G	0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	
634. nc3h/coch2	G 0 8.512	/E+01	300 5	000	9	5		0	0	0	692. pent3en1ol	G	0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	
635. etcoetp	G 0 8.512	7E+01	300 5	000	9	5 1		0	0	0	693. pent4en1ol	G	0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	(
636. prcoch3-2	G 0 8.512	7E+01	300 5	000	9	5 1		0	0	0	694 c4h73d1oh	G	0 7 2108E+01	300	5000	8	4	1	0	0	
637 pro1ob=3	G 0 5 908	98+01	298 3	000	7	3 1		0	0	0	COE mant2ah 1	0	0 0 71428.01	200	2000	11	Ē	1	0	0	
629 proceb2 1	C 0 9 512	72:01	200 5	000	0	5	-	0	0	0	695. pentzon-1	G	0 8.71436+01	200	3000	11	5	1	0	0	
638. precens-1	G U 8.512	/E+01	300 3	000	9	5 1		0	0	0	696. pent2oh-2	G	0 8.7143E+01	200	3000	11	5	1	0	0	(
639. sc4h9oh	G 0 7.412	4E+01	300 4	000	10	4 1		0	0	0	697. pent2oh-3	G	0 8.7143E+01	200	3000	11	5	1	0	0	(
640. etcoet	G 0 8.613	5E+01	300 5	000	10	5 1	L	0	0	0	698. pent2oh-4	G	0 8.7143E+01	200	3000	11	5	1	0	0	(
641. etcoets	G 0 8.512	7E+01	300 5	000	9	5 1		0	0	0	699 pont2oh-5	ĉ	0 9 71/35+01	200	3000	11	5	1	0	0	
642 c4b4c	C 0 6 907	62+01	200 4	000	4	4		0	0	0	by penczon-5	G	0 0.71455101	200	5000	10	5	1	0	0	
042. C41140	G 0 0.007	00101	200 0	000	-			0	0	0	/00. pentlenzol	G	0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	(
643. C3N5-a00	G U /.3U/	2E+01	298 3	000	5	3 4	2	0	0	0	701. pent2en2ol	G	0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	(
644. but2mldm	G 0 6.912	7E+01	300 5	000	9	5 ()	0	0	0	702. pent3en2ol	G	0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	(
645. petcoc2h3	G 0 8.311	1E+01	300 1	900	7	5 1		0	0	0	703 nent4en2ol	G	0 8 6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	(
646. setcoc2h3	G 0 8.311	1E+01	300 5	000	7	5 1		0	0	0	704 c4b73d2cb	č	0 7 21095+01	300	5000	-0	4	1	0	õ	
647 pa2b4aba	C 0 5 707	20101	200 /	000	6	- 	-	0	0	0	704. 0417502011	G	0 7.21000101	200	5000	0	4	1	0	0	
647. pc2114CHO	G 0 3.707	36701	300 4	000	J	5		0	0	0	/05. C4n/1d1on	G	0 /.2108E+01	300	5000	8	4	1	0	0	(
648. c5h915	G U 6.912	/E+01	300 5	000	9	5 ()	0	0	0	706. c4h63d2oh2	G	0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	(
649. c3h5-aooh	G 0 7.408	0E+01	298 3	000	6	3 2	2	0	0	0	707. c4h61d1oh3	G	0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	(
650. c7h12	G 0 9.617	4E+01	300 5	000	12	7 ()	0	0	0	708 sc4h8ob-4	G	0 7 3116E+01	300	3000	9	4	1	0	0	(
651 etcoeto2	G 0 1 171	3E+02	300 9	000	9	5 5	3	0	0	0	709 pro2ob-2	č	0 5 00000001	200	3000	7	3	1	0	õ	, i
(5). 0000002	6 0 1.1/1	CD 102	200 5	000	10	c		0	0	0	709. prozon=z	G	0 3.90096+01	290	3000	/	3	1	0	0	
652. nprcoet	G U 1.001	6E+UZ	300 3	000	12	0		0	0	0	710. proloh-1	G	0 5.9089E+01	298	3000	7	3	1	0	0	(
653. prcoet-2	G 0 9.915	4E+01	300 5	000	11	6		0	0	0	711. pent3oh1d	G	0 8.6135E+01	300	5000	10	5	1	0	0	(
654. prcoet-3	G 0 9.915	4E+01	300 5	000	11	6 1	L	0	0	0	712. prolohld	G	0 5.8081E+01	200	6000	6	3	1	0	0	(
655, nprcoets	G 0 9.915	4E+01	300 5	000	11	6 1		0	0	0	713 c2h5co3	G	0 8 9072E+01	300	3000	5	3	3	0	0	(
656 c4b73o2	G 0 8 709	98+01	300 4	000	7	4	>	0	0	õ	714 c2h5cc5	c	0 0.0070E101	200	2000	6	2	2	0	0	2
650. 04117502	0 0 0.709	00.01	200	000	,	1 2	-	0	0	0	714. C2115C0511	G	0 9.0079E+01	300	3000	8	3	3	0	0	
65/. C4n/102	G U 8.709	9E+01	300 4	000	/	4 4	2	0	0	0	715. c2h5co2	G	0 7.3072E+01	300	3000	5	3	2	0	0	
658. c4h63ooh4j	G 0 8.709	9E+01	300 4	000	7	4 2	2	0	0	0	716. c5h52	G	0 6.5096E+01	300	5000	5	5	0	0	0	(
659. A2	G 0 1.281	8E+02	200 6	000	8 1	.0 ()	0	0	0	717. c5h5o24	G	0 8.1095E+01	200	6000	5	5	1	0	0	(
660. Alc2h3	G 0 1.041	5E+02	300 5	000	8	8 ()	0	0	0	718 butlenlol	G	0 7 2108E+01	300	5000	8	4	1	0	0	(
661 ic4b7v	C 0 5 510	02+01	300 5	000	7	1 (0	0	õ	710 but2on1o1	ć	0 7 210000101	200	5000	0	4	1	0	0	
001. 10411/0	G 0 0.010	000101	200 3	000	10			0	0	0	719. Duczenitor	G	0 7.21086401	300	5000	0	4	1	0	0	
662. mcpma	G U 8.214	/E+01	300 3	000	10	6 (J	0	0	0	720. but3enlol	G	0 7.2108E+01	300	5000	8	4	1	0	0	(
663. mcptd	G 0 8.214	7E+01	100 5	000	10	6 ()	0	0	0	721. butlen1ol3	G	0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	(
664. mcpsld	G 0 8.214	7E+01	300 3	000	10	6 ()	0	0	0	722. but2en1014	G	0 7.1100E+01	300	5000	7	4	1	0	0	(
665 mcps2d	G 0 8 214	7E+01	300	000	10	6 ()	0	0	0	723 lc6h5	Ğ	0 7 7107F+01	300	3000	5	6	0	ñ	0	
666 - Ch1004	G 0 0.214	70.01	200 2	000	10	<i>c</i>	·	0	0	0	725. 10000	0	0 1.011070100	200	5000	5	5	0	0	0	
666. C6n1024	G U 8.214	7E+01	300 3	000	10	0 ()	0	0	0	724. cyc5n902	G	0 1.0113E+02	300	5000	9	5	2	0	0	(
667. c6h9135	G 0 8.113	9E+01	300 3	000	9	6 ()	0	0	0	725. c5h5ohl	G	0 8.2103E+01	300	5000	6	5	1	0	0	(
668. mcp2dp	G 0 7.912	3E+01	100 5	000	7	6 ()	0	0	0	726. c5h5oh2	G	0 8.2103E+01	300	5000	6	5	1	0	0	(
669. mcp2dt	G 0 7.912	3E+01	200 @	000	7	6 ()	0	0	0	727. c5h5oh3	G	0 8.2103E+01	300	5000	6	5	1	0	0	(
670 cyc6b11	G 0 8 315	5E+01	300 3	000	11	6 ()	0	0	õ	729 but2m20	č	0 9 71/35+01	200	3000	11	5	1	0	õ	
(71	G 0 0.313	00.01	200 2	000			, ,	0	0	0	720. DULZHIZO	G	0 0./1435701	200	5000	11	5	1	0	0	
0/1. CC0N913	G U 8.113	9E+01	300 3	000	7	0 (J	U	U	U	/29. but2m2dlo	G	∪ 8.512/E+01	300	5000	9	5	T	U	U	(
672. cc6h914	G 0 8.113	9E+01	300 3	000	9	6 ()	0	0	0	730. but2mld3o	G	0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	(
673. c6h9136	G 0 8.113	9E+01	300 3	000	9	6 ()	0	0	0	731. but2m1d3o2	G	0 1.0113E+02	300	5000	9	5	2	0	0	(
674. c6h1112	G 0 8 315	5E+01	300	000	11	6 ()	0	0	0	732, but2m2d4o	G	0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	(
675 c6b1111	G 0 8 315	5E+01	300 5	000	11	6 0		0	0	ñ	733 but 3ml dto	c	0 8 5127E+01	300	5000	à	5	1	0	õ	
075. CONTIL	G U 8.313	00-TUI	200 5	000	±±		,	0	0	0	755. DULSHILDEO	G	0 0.012/6+01	200	5000	2	5	1	0	0	
6/6. mib3j	G U 1.011	3E+02	300 5	000	Э	5 2	2	U	U	U	/34. isopyooh	G	U 1.0012E+02	300	5000	8	5	2	U	U	(
735. isopyo	G 0 8.3111E+01	L 300	5000	7	5	1	0	0	0	793. pent2oh4d-1	G 0 8.5127E+0	1 300	5000	9	5	1	0	0			
------------------	----------------	-------	------	-----	----	---	---	---	---	-------------------	---------------	-------	------	----	---	---	---	---			
736, but2m1d4	G 0 6.9127E+01	300	3000	9	5	0	0	0	0	794, pentlohld-5	G 0 8.5127E+0	1 300	5000	9	5	1	0	0			
737 ic3b5och2	G 0 7 1100E+01	298	2000	7	4	1	0	0	õ	795 but2m2ob3o2	G 0 1 1914E+0	2 200	5000	11	5	3	õ	0			
739 ic/h9ohto2	C 0 1 0511E+02	2 300	5000	9	4	3	0	0	0	796 but2m2d1oob	G 0 1 0213E+0	2 300	5000	10	5	2	0	0			
730. +-450-2	G 0 1.0511E102	2 300	5000	9	4	5	0	0	0	797. g4h7aghal 1	C 0 1 0012E10	2 250	2000	10	5	2	0	0			
739. tC4N902	G 0 8.9115E+01	L 300	5000	9	4	2	0	0	0	797. C4H70CH01=1	G 0 1.0012E+0	2 250	3000	0	5	2	0	0			
740. c2h3choch3	G 0 7.1100E+01	L 300	5000	7	4	1	0	0	0	/98. C4n/ocho1-2	G 0 1.0012E+0	2 250	3000	8	5	2	0	0			
741. c4h713ooh	G 0 8.8107E+01	L 300	5000	8	4	2	0	0	0	/99. c4h/ocho1-3	G 0 1.0012E+0	2 250	3000	8	5	2	0	0			
742. bt3m2oh3d1	G 0 8.5127E+01	L 100	5000	9	5	1	0	0	0	800. c4h6ochol-21	G 0 9.9110E+0	1 250	3000	7	5	2	0	0			
743. bt2mloh3d2	G 0 8.5127E+01	L 100	5000	9	5	1	0	0	0	801. c4h6ocho1-32	G 0 9.9110E+0	1 250	3000	7	5	2	0	0			
744. bt3mloh3d2	G 0 8.5127E+01	L 100	5000	9	5	1	0	0	0	802. c3h6cho-4o2	G 0 1.0310E+0	2 300	4000	7	4	3	0	0			
745. R302	G 0 1.8323E+02	2 100	5000	15	10	3	0	0	0	803. c3h6cho-3o	G 0 8.7099E+0	1 300	4000	7	4	2	0	0			
746, R402	G 0 1.8323E+02	2 100	5000	15	10	3	0	0	0	804. c3h6cho-3o2	G 0 1.0310E+0	2 300	4000	7	4	3	0	0			
747 B502	G 0 1 8323E+02	2 100	5000	15	10	3	0	0	õ	805. ch3chococh3	G 0 8.7099E+0	1 300	3000	7	4	2	0	0			
749 0602	C 0 1 9323E102	100	5000	15	10	2	0	0	0	806. pent1oh3d-5	G 0 8.5127E+0	1 300	5000	9	5	1	0	0			
740. R002	G 0 1.6323E+02	100	5000	1.4	10	1	0	0	0	807 pent2oh1d=3	G 0 8 5127E+0	1 300	5000	9	5	1	0	0			
749. OLEF	G U 1.5022E+02	2 100	5000	14	10	1	0	0	0	808 pont2oh2d=4	C 0 9 5127E+0	1 300	5000	9	5	1	0	0			
750. QOOH	G 0 1.8323E+02	2 100	5000	15	10	3	0	0	0	200 pent2oh2d 5	C 0 0 5127E10	1 200	5000	0	5	1	0	0			
751. O2QOOH	G 0 2.1523E+02	2 100	5000	15	10	5	0	0	0	809. penczonsu-5	G 0 0.5127ETC	1 300	5000	9	5	1	0	0			
752. cyOX	G 0 1.6622E+02	2 100	5000	14	10	2	0	0	0	810. CZN5COCZN4p	G U 8.5127E+0	1 300	5000	9	5	1	0	0			
753. HOOUOOH	G 0 2.1523E+02	2 100	5000	15	10	5	0	0	0	811. c2h5coc2h4s	G 0 8.5127E+0	1 300	5000	y	5	1	0	0			
754. OUOOH	G 0 1.9822E+02	2 100	5000	14	10	4	0	0	0	812. c2h5coc2h3	G 0 8.4119E+0	1 300	5000	8	5	1	0	0			
755. OUO	G 0 1.8121E+02	2 100	5000	13	10	3	0	0	0	813. pc2h4coc2h3	G 0 8.3111E+0	1 300	5000	7	5	1	0	0			
756. ar	G 0 3.9948E+01	L 300	5000	0	0	0	0	1	0	814. sc2h4coc2h3	G 0 8.3111E+0	1 300	5000	7	5	1	0	0			
757 n2	G 0 2 8013E+01	300	5000	0	0	0	2	0	0	815. c2h3coc2h3	G 0 8.2103E+0	1 300	5000	6	5	1	0	0			
759 ho	C 0 4 0026E+00	300	5000	0	0	0	0	õ	1	816. c2h5coc2h2	G 0 8.3111E+0	1 300	5000	7	5	1	0	0			
750. 110	C 0 9 21557101	200	2000	11	G	0	0	0		817. but2m1d3ooh	G 0 1.0213E+0	2 300	5000	10	5	2	0	0			
759. mcpm	G 0 8.3133E+01	200	3000	11	0	0	0	0	0	818, but2m2d4ooh	G 0 1.0213E+0	2 300	5000	10	5	2	0	0			
760. mcpt	G U 8.3155E+UI	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	819. but3mldtooh	G 0 1.0213E+0	2 300	5000	10	5	2	õ	0			
761. mcps1	G 0 8.3155E+01	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	820 c5b10co	G 0 9 8146F+0	1 300	5000	10	6	1	0	0			
762. mcps2	G 0 8.3155E+01	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	821 c5h9co	C 0 9 7139E+0	1 300	4000	10	6	1	0	0			
763. c6h7135-1	G 0 7.9123E+01	L 100	5000	7	6	0	0	0	0	021. C5119C0	G 0 9.7130E10	1 200	5000	0	G	1	0	0			
764. mcptds1ds	G 0 7.9123E+01	L 100	5000	7	6	0	0	0	0	822. 031800	G 0 9.0130E+0	1 300	3000	0	6	1	0	0			
765. mcpmds1	G 0 8.1139E+01	L 300	3000	9	6	0	0	0	0	823. but3m2on-3	G U 8./143E+U	1 200	3000	11	5	1	0	0			
766. mcptds2	G 0 8.1139E+01	L 100	5000	9	6	0	0	0	0	824. 1C4h8to2h1o	G 0 1.0511E+0	2 300	5000	9	4	3	0	0			
767. mcptds1b	G 0 8.1139E+01	300	3000	9	6	0	0	0	0	825. c3h6cho-2o2	G 0 1.0310E+0	2 300	4000	7	4	3	0	0			
768 mcns2ds1	G 0 8 1139E+01	300	3000	9	Ē	0	0	0	õ	826. c4h63ooh4o2	G 0 1.1910E+0	2 300	4000	7	4	4	0	0			
760 mantda2da	C 0 7 0122E+01	100	5000	7	e	0	0	0	0	827. c4h6looh4o2	G 0 1.1910E+0	2 300	4000	7	4	4	0	0			
769. mentelale	G 0 7.9123E+01	100	5000	7	0	0	0	0	0	828. c4h54o2h3*o	G 0 1.0209E+0	2 300	4000	6	4	3	0	0			
770. meptasiap	G 0 7.9123E+01	100	5000	/	6	0	0	0	0	829. c4h54o2h1*o	G 0 1.0209E+0	2 300	4000	6	4	3	0	0			
//l. mcptds2dp	G 0 7.9123E+01	100	5000	7	6	0	0	0	0	830. but3m2oh3o2	G 0 1.1914E+0	2 200	5000	11	5	3	0	0			
772. c6h1014	G 0 8.2147E+01	L 300	3000	10	6	0	0	0	0	831. o2tc4h8io2h	G 0 1.2111E+0	2 300	4000	9	4	4	0	0			
773. ch2c(oh)2	G 0 6.0053E+01	L 298	5000	4	2	2	0	0	0	832 o2ic4h8io2h	G 0 1 2111E+0	2 300	4000	9	4	4	0	0			
774. pent2mldm	G 0 8.3155E+01	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	833 nent1o2b2o2	G 0 1 3514E+0	2 300	5000	11	5	4	0	0			
775. pent2m1d5	G 0 8.3155E+01	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	834 pont1o2h3o2	C 0 1 351/E+0	2 300	5000	11	5	1	0	0			
776. pent3mld5	G 0 8.3155E+01	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	935 c2h5coch2c2	C 0 1 0310E+0	2 300	5000	7	1	3	0	0			
777. pent4m1d5	G 0 8.3155E+01	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	035. C2H3COCH2O2	G 0 1.0310E10	2 300	5000	,	4	5	0	0			
778. c4h6looh4i	G 0 8.7099E+01	L 300	4000	7	4	2	0	0	0	836. C418CO-2020	G 0 1.1713E+0	2 300	5000	9	5	3	0	0			
779. c3h6cho-20	G 0 8.7099E+01	300	4000	7	4	2	õ	0	õ	837. C4n8cho-202	G U 1.1/13E+0	2 300	5000	9	5	3	0	0			
780 ch2cohch2	G 0 5 7073E+01	300	5000	5	3	1	Õ	0	õ	838. c4h8cho-302	G 0 1.1/13E+0	2 300	5000	y	5	3	0	0			
701 a4b7coolly	C 0 9 2111E-01	200	5000	5	E	1	0	0	0	839. c4h8co-3o2h	G 0 1.1713E+0	2 300	5000	9	5	3	0	0			
781. C4n7Coally	G 0 8.3111E+01	L 300	5000	7	2	1	0	0	0	840. c4h8cho-4o2	G 0 1.1713E+0	2 300	5000	9	5	3	0	0			
/82. C2N3COCh2	G U 6.9U84E+U	L 300	4000	5	4	1	U	U	U	841. c4h8co-4o2h	G 0 1.1713E+0	2 300	5000	9	5	3	0	0			
/83. o2pc2h4cho	G U 8.9072E+01	L 300	4000	5	3	3	U	U	U	842. c4h8cho-5o2	G 0 1.1713E+0	2 300	5000	9	5	3	0	0			
784. opc2h4cho	G 0 7.3072E+01	L 300	4000	5	3	2	0	0	0	843. c4h8co-5o2h	G 0 1.1713E+0	2 300	5000	9	5	3	0	0			
785. pent4mld3	G 0 8.3155E+01	L 300	3000	11	6	0	0	0	0	844. pent1o2h5o2	G 0 1.3514E+0	2 300	5000	11	5	4	0	0			
786. c2h3och2	G 0 5.7073E+01	L 298	6000	5	3	1	0	0	0	845. pent5o2h1*o	G 0 1.1813E+0	2 300	5000	10	5	3	Ó	0			
787. pent3oh1d-5	G 0 8.5127E+01	L 298	6000	9	5	1	0	0	0	846 pent1o2h4o2	G 0 1 3514F+0	2 300	5000		5	4	0	0			
788. pent3oh1d-3	G 0 8.5127E+01	L 300	5000	9	5	1	0	0	0	847 pent202h102	C 0 1 351/E+0	2 300	5000	11	5	4	0	0			
789. bt2m2oh3d1	G 0 8.5127E+01	300	5000	9	5	1	0	0	0	040 pont202h2-2	C 0 1 2514570	2 200	5000	11	5	4	0	0			
790 pent1oh1d=3	G 0 8 5127E+01	300	5000	9	5	1	õ	õ	õ	040. pent2020302	G U 1.3314E+U	2 300	5000	11	5	4	0	0			
791 pent1oh2d=4	C 0 8 5127E+01	300	5000	9	5	1	ő	0	0	045. pent202n402	G U 1.3314E+U	2 300	5000	11	5	4	U	U			
702 pont1oh/1 1	C 0 0 5127ET01	2 200	5000	9	5	1	0	0	0	sou. pent202n502	G U 1.3514E+0	∠ 300	5000	11	5	4	U	U			
/sz. pencron4d=1	G U 0.J12/E+UI	L 300	2000	7	J	1	U	U	U												

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 pent/o2h2*o	c	0 1 1813E+02	300	5000	10	5	3	ů 0	ů 0	n
950 pont5o2h2*o	c	0 1.10130102	300	5000	10	5	3	0	0	0
000 pentioble	G	0 1.10135+02	200	5000	10	J	5	0	0	0
860. pentioznaro	G	0 1.1013E+UZ	200	5000	10	5	3	0	0	0
861. pent202n3*0	G	U 1.1813E+U2	300	5000	10	5	3	0	0	0
862. prcoch3-102	G	0 1.1/13E+02	300	5000	9	5	3	0	0	0
863. pc4h8oh-200	G	0 1.0511E+02	300	3000	9	4	3	0	0	0
864. sc4h8oh-loo	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. mcps2dt	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 C	ONSI	DERED				A		b	E	
1. F3(5)+o2=>R	302					2.00	E+12	0.0	0.0	C
2. F4(3)+o2=>R	402					2.00	E+12	0.0	0.0	C
3. F5(9)+o2=>R	502					2.00	E+12	0.0	0.0	C
4. F6(7)+o2=>R	602					2.00	E+12	0.0	0.0)
5. R302=>F3(5)	+02					1.70	E+16 E+16	0.0	28000.0)
7 $P502 = >F5(9)$	+02					1 70	5710 F+16	0.0	28000.0	, 1
8 B602=>F6(7)	+02					1 70	E+16	0.0	28000.0	,)
9. F3(5)+o2=>0	LEF+1	ho2				1.00	E+11	0.0	5000.0)
10. F4(3)+o2=>0	LEF+]	ho2				1.00	E+11	0.0	5000.0)
11. R302=>OLEF+	no2					2.55	E+16	-1.2	32500.0)
12. R402=>OLEF+	no2					2.55	E+16	-1.2	32500.0)
13. R302=>QOOH						2.00	E+11	0.0	17000.0)
14. R402=>QOOH						2.00	E+11	0.0	17000.0)
16 B602=>000H						2.00	6711 E+11	0.0	17000.0	,)
17.000H = > CV0X + 0	ch					5.00	E+11	0.0	15000.0	,)
18. QOOH+o2=>020	200н					5.60	E+12	0.0	0.0)
19. 02Q00H=>HOO	јоон					1.00	E+11	0.0	17000.0)
20. HOOUOOH=>OU	OOH+0	oh				1.00	E+09	0.0	7500.0)
21. OUOOH=>OUO+	oh					8.40	E+13	0.0	41521.0)
22. OUO=>3co+ic	4h7v	+c3h5-t+h				1.00	E+13	0.0	15000.0)
23. h+F1(1)=ten	chon	e ata at D-	1 0.0	E 02(a+m)		1.13	E+14 5	-0.6	10102	,
Rate coeff:	lcier	nts at P=	1 00	E=03 (atm) E=02 (atm)	,)	3.99	JE+43 /F+32	-9.9	10192	.0
Rate coeff	lcier	nts at P=	1.00	E-01 (atm)	,)	7.39	8E+22	-3.4	3341	.0
Rate coeff:	Lcier	nts at P=	1.00	E+00 (atm)		3.31	9E+16	-1.4	1076	.0
Rate coeff:	Lcier	nts at P=	1.00	E+01 (atm))	1.13	0E+14	-0.6	178	. 0
Rate coeff:	Lcier	nts at P=	1.00	E+02(atm))	4.16	2E+13	-0.5	20	. 0
24. h+F2(11)=fe	ncho	ne				1.03	E+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.	n+F6(7)=renchone	- +	D_	1 00E 02(atm)	5.11E+14 6 101E+44	-0.0	10202 0
	Rate coefficients	at at	г — D—	1.00E-03(atm)	7 6555133	-9.0	10293.0
	Rate coefficients	at at	P-	1.00E=02(atm)	7.0JJET33 9 119E123	-0.1	3549 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.	$ho^{2}+F1(1)=o^{2}+fench$	ione		(,	2.76E-02	3.8	6324.0
30.	ho2+F2(11)=o2+fence	chone	Э		9.32E-02	3.7	6906.0
31.	ho2+F3(5)=o2+fenct	ione			2.76E-02	3.8	6324.0
32.	ho2+F4(3)=o2+fenct	none			2.76E-02	3.8	6324.0
33.	ho2+F5(9)=o2+fench	none			3.06E+00	3.3	9354.0
34.	ho2+F6(7)=o2+fench	none			3.06E+00	3.3	9354.0
35.	h+fenchone=h2+F3(5	5)			1.92E+09	1.5	5750.0
36.	h+fenchone=h2+F4(3	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	7)			1.33E+06	2.5	6756.0
39.	o+fenchone=oh+F3(5	5)			1.11E+03	3.2	14117.0
40.	o+fenchone=oh+F4(3	3)			1.11E+03	3.2	14117.0
41.	o+fenchone=oh+F6(7	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	5(9)			1.35E+00	3.8	-2897.0
44.	oh+fenchone=h2o+F6	5(7)			2.70E+00	3.8	-2897.0
45.	oh+tenchone=h2o+F3	3 (5)			4.64E+07	1.6	-35.0
46.	on+tenchone=h2o+F4	1(3)	- 、		4.64E+07	1.6	-35.0
4/.	noz+fenchone=h2o2+	-E'3 (5)		3.36E+13	0.0	17686.0
48.	noz+fenchone=h2o2+	- E'4 (3	5)		3.36E+13	0.0	1/686.0
49. 50	ho2+ferchore=h2o2+	- E O (S	2) 7)		1.14E+U2	J.∠	16250.0
50.	ch3+fenchono-ch4+T	E 0 () 5 / 0 \	0		2.285+U2 6 005±19	J.Z	12620.0
52.	ch3+fenchone=ch4+F	: J (9) 76 (7)			1.20E+13	0.0	12620.0
~		~ \ / /				· · ·	

52	ch2 fonchoncech4 I	-2/5			6 495106	1 0	0700 0
55.	clistienchone-cli4te))		0.40E+00	1.9	0700.0
54.	ch3+lenchone=ch4+h	4(3)		0.48E+U0	1.9	1700.0
55.	cn3o2+Ienchone=cn3	sozr	1+E3(5)		3.36E+13	0.0	17686.0
50.	cn3o2+Ienchone=cn3	sozr	1+E4(3)		3.36E+13	0.0	1/686.0
57.	cn3o2+Ienchone=cn3	sozr	1+E'5 (9)		1.14E+02	3.2	16250.0
58.	cn302+Ienchone=ch3	sozr	1+F.P.(/)		Z.28E+UZ	3.2	16250.0
59.	$F_{1}(1) = F_{2}(11)$		D 1 00D 01 (1	5.86E+22	-3.1	41/86.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E-01(a	tm)	1.51/E+42	-9.5	4/863.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+00 (a	tm)	3.083E+34	-6.8	45775.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+01 (a	tm)	5.85/E+22	-3.1	41/86.0
60	Rate coefficients	aı	P= 1.00E+02(a	um)	3.409E+13	-0.2	38040.0
60.	F4(3) = F1(1)		D- 1 00D 01/-	+ \	5.55E+U6	1.9	33847.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E-01(a	LIII)	1./28E+30	-/.4	43/10.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+00(a)	UIII)	8.069E+18	-1.9	38113.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+01(a		3.333E+06	1.9	33847.0
C1	Rate coefficients	aı	P= 1.00E+02(a	um)	1.100E+U5	Z.4	33943.0
bΙ.	$F_{5}(9) = F_{1}(1)$	- +	D= 1 00E 01(-	+	1.10E-00	J.1	23133.0
	Rate coefficients	at at	P= 1.00E-01(a	tm)	6.257E.00	4.0	10172 0
	Rate coefficients	at at	P= 1.00E+00(a	till)	0.237E-00	J.U 5 1	22152 0
	Rate coefficients	at at	P = 1.00E+01(a)	tm)	3 036E-00	13	27901 0
62	$F_1(1) = F_3(5)$	ac	1- 1.00B/02(a	ciii)	1 935+07	1 8	35103 0
02.	Rate coefficients	at	P = 1 00E - 01 (a)	+m)	1 059E+32	-5.8	45392 0
	Rate coefficients	at	P = 1 00E + 00 (a)	+m)	2 829E+14	-0.4	38203 0
	Rate coefficients	at	P = 1 00E+01 (a)	tm)	1 931E+07	1.8	35103.0
	Rate coefficients	at	P = 1 00E + 02 (a)	tm)	1 005E+06	2 2	34553 0
63.	F6(7) = F1(1)	au	1 1.002.02.(0	citt)	1.24E+29	-5.6	27160.0
	Rate coefficients	at	P = 1.00E - 01(a)	tm)	2.217E+39	-9.3	30800.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+00(a	tm)	9.647E+33	-7.4	28480.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+01(a	tm)	1.243E+29	-5.6	27160.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+02(a	tm)	2.811E+17	-1.9	22760.0
64.	F4(3)=F3(5)				1.62E-34	13.3	11178.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E-01(a	tm)	3.620E+05	1.1	24732.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+00(a	tm)	1.145E-20	9.0	15366.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+01(a	tm)	1.618E-34	13.3	11178.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+02(a	tm)	9.601E-31	12.4	16306.0
65.	F5(9)=F4(3)				1.83E-27	10.7	4168.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E-01(a	tm)	1.064E+36	-9.0	25389.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+00(a	tm)	1.682E+03	1.3	13932.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+01(a	tm)	1.834E-27	10.7	4168.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+02(a	tm)	1.488E-41	15.2	2009.0
66.	F4(3)=F2(11)				1.04E+25	-4.0	45083.0
	Rate coefficients	at	P = 1.00E - 01 (a	tm)	7.261E+57	-14.6	56506.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+00(a	tm)	5.072E+43	-9.8	51975.0
	Rate coefficients	at	P = 1.00E + 01 (a)	tm)	1.040E+25	-4.0	45083.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+02(a	tm)	4.844E+12	-0.2	40027.0
67.	F6(7) = F4(3)				6.79E+30	-6.3	21060.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E-01(a	tm)	1.332E+54	-14.1	2/931.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+00 (a	tm)	1.984E+42	-10.1	24418.0
	Rate coefficients	at	P= 1.00E+01(a	tm)	6./88E+30	-6.3	21060.0
<u> </u>	Rate coefficients	aı	P= 1.00E+02(a	um)	3.965E+16	-1.8	13/68.0
00.	Poto coofficiente	- +	D= 1 00E 01(-	+	7 1220145	-3.1 10 C	41003.0
	Rate coefficients	at at	P= 1 00E+00(a	+m)	2 92/E+35	-10.0	49333.0
	Rate coefficients	а t	P= 1 00E+01(a	tm)	7 9738+22	-3 1	41865 0
	Rate coefficients	at	P = 1 00E+02(a)	tm)	3 138E+13	-0.2	38028 0
69.	F5(9) = F3(5)	ωu		/	3.83E+19	-2.6	23697.0
•	Rate coefficients	at	P= 1.00E-01(a	tm)	2.484E+45	-10.9	32892.0
			ų -				

	Rate coefficients	at	P=	1.00E+00(atm)	8.069E+34	-7.4	29497.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+01(atm)	3.827E+19	-2.6	23697.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+02(atm)	5.288E+08	3 0.8	19135.0
70.	F6(7)=F3(5)				1.58E+29	-5.7	27208.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E-01(atm)	2.505E+41	-10.0	31722.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+00(atm)	4.664E+34	-7.6	28791.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+01(atm)	1.582E+29	-5.7	27208.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+02(atm)	2.896E+17	-1.9	22766.0
71.	F6(7)=F2(11)				1.25E+43	-9.5	48120.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E-01(atm)	1.225E+58	3 -15.1	51789.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+00(atm)	1.074E+55	5 -13.5	52316.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+01(atm)	1.251E+43	-9.5	48120.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+02(atm)	4.836E+25	-4.0	40238.0
72.	F5(9)=F6(7)				1.12E+38	-8.5	25758.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E-01(atm)	3.680E+75	5 -20.8	37635.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+00(atm)	4.029E+59	-15.4	33206.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+01(atm)	1.116E+38	-8.5	25758.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+02(atm)	1.388E+18	-2.3	18048.0
73.	F5(9)=F2(11)				8.93E+32	-6.4	35768.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E-01(atm)	1.025E+73	3 -19.3	50533.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+00(atm)	2.386E+57	-14.1	45242.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+01(atm)	8.931E+32	-6.4	35768.0
	Rate coefficients	at	P=	1.00E+02(atm)	2.764E+15	5 -1.0	28430.0
74.	F1(1)+o2=Fnone+ho2	2			4.50E+11	0.0	5000.0
75.	F2(11)+o2=Fnone+hc	2			3.16E+12	0.0	5000.0
76.	F3(5)+o2=Fnone+ho2	2			2.07E+12	0.0	5000.0
77.	F4(3)+o2=Fnone+ho2	2			4.00E+12	0.0	5000.0
78.	F1(1)=>Fnone+h				5.79E+30	-5.2	42963.5
79.	F2(11)=>Fnone+h				5.79E+30	-5.2	42963.5
80.	F3(5)=>Fnone+h				5.79E+30	-5.2	42963.5
81.	F4(3)=>Fnone+h				5.79E+30	-5.2	42963.5
82.	F1(1)=GD(1)+ch3				9.38E+21	-1.4	101546.2
83.	F1(1)=GD(2)				1.13E+16	-0.5	30116.3
84.	F1(1)=S(279)				4.79E+13	0.2	27452.4
85.	F1(1)=GD(3)				3.98E+14	-0.1	30695.6
86.	F1(1)=S(660)				6.92E+11	0.6	23984.4
87.	GD(2) = c2h4 + GD(7)				8.53E+09	0.8	17474.5
88.	GD(3) = c2h4 + GD(7)				1.66E+11	0.3	20999.6
89.	S(660)=ic3h6co+mcp	tds	2		4.55E+02	2.4	28294.3
90.	S(279)=co+GD(11)				1.95E+18	-1.2	16546.1
91.	GD(7)=ch3+GD(8)				4.74E+13	0.5	41411.6
92.	GD(7)=GD(9)				9.35E+09	1.6	48145.3
93.	GD(9)=co+GD(10)				7.07E+20	-2.1	31749.3
94.	GD(11)=GD(12)				1.47E+05	2.2	56572.1
95.	GD(12) = c2h4 + GD(10)				2.09E+13	0.1	36085.3
96.	GD(10)=c3h4-p+ic4h	17v			5.97E+13	0.6	43858.5
97.	F2(11)=S(703)				1.32E+37	-6.8	40216.1
98.	F2(11)=S(224)				4.37E+17	-0.7	29066.7
99.	F2(11)=ZS(16)				4.17E+43	-8.1	51534.7
100.	F2(11)=ZS(19)+ch3				2.53E+11	1.4	87331.4
101.	S(703)=ZS(20)				1.85E+11	0.8	26526.3
102.	ZS(20)=dipco-2d4j+	-c3h	4-p		1.60E+10	0.9	42338.7
103.	S(224)=ZS(14)+co				3.89E+18	-1.2	16546.1
104.	ZS(14)=ZS(15)				2.09E+09	1.5	33299.5
105.	ZS(15)=c5h8-12d3m+	ic4	h7		1.14E+11	0.6	46331.7
106.	ZS(16)=ZS(17)				7.79E+12	0.4	19164.9
107.	ZS(17)=ZS(23)+co				3.89E+18	-1.2	16546.1
108.	ZS(23)=c5h8-12d3m+	ic4	h7		1.14E+11	0.6	46331.6

109.	F3(5)=ZS(1)	1.13E+12	0.7	28987.2
110.	$F_{3}(5) = S(661)$	6.98E+08	1.3	20704.0
111	$F_{3}(5) = 7S(2)$	6 02E+08	1 4	23134 0
110	$F_{2}(1) = F_{2}(2)$	1 210117	0.6	22226 0
112.	23(1)-23(3)	1.316+17	-0.0	33230.0
113.	S(661)=mcps2dt+1c3h6co	5.21E+20	-1.4	44/28.0
114.	ZS(2)=ZS(3)	2.34E+14	-0.4	27350.0
115.	ZS(3)=ZS(5)+ch3	2.39E+12	0.6	38280.0
116.	ZS(3)=>c6h10-13d4m+co+c3h5-t	4.90E+13	0.4	24447.0
117.	mcps2dt=mcptds2d+h	1.02E+04	3.0	30301.1
110	mapa2dt=ab2-ava5-3d+b	1 5000+10	1 2	30235 /
110.		1 275,10	1.5	1040 0
119.	C6n10-13d4m+on=cn20+but3m1dt	1.3/E+12	0.0	-1040.0
120.	c6h10-13d4m+oh=ch3coch3+c3h5-a	1.37E+12	0.0	-1040.0
121.	c6h10-13d4m+oh=c2h3cho+ic3h7	1.37E+12	0.0	-1040.0
122.	F4(3) = GD(4) + ch3	1.90E+13	0.8	85829.5
123.	F4(3) = GD(5)	1.37E+07	1.9	24946.9
124	F4(3) = GD(6)	4 30E+09	1 2	28900 0
125	$E_{1}(3) = C_{1}(376)$	1.258+16	_0 5	27100.0
125.	P(5) = 2(5/6)	2 020116	0.5	20045 7
120.	GD(5) = CII5+GD(15)	3.036713	-0.4	30843.7
127.	GD(5) = GD(14)	2.23E+10	0.6	23/39.1
128.	GD(5)=GD(15)	1.94E+14	0.1	29578.2
129.	GD(6) = co + GD(18)	1.95E+18	-1.2	16546.1
130.	S(376)=GD(14)	7.98E+14	-0.3	26613.8
131.	S(376)=GD(20)	3.46E+15	-0.0	12412.6
132	GD(15) = co+GD(16)	1 90E+14	-0.5	3582 1
122.	CD(14) = but 3m1 dt + CD(17)	6 07F+14	-0.4	17525 5
104	OD(14) + bacomidc(OD(17))	4 500110	0.4	-1000.0
134.	GD(14)+ho2=co+c2h3coch3+but3m1dt+on	4.50E+12	0.0	0.0
135.	GD(16)=1sope+1c4h/v	1.49E+11	1.3	42869.8
136.	GD(16)+ho2=c2h3coch3+but3m1dt+oh	4.50E+12	0.0	0.0
137.	GD(18)=GD(16)	8.80E+10	0.8	25424.5
138.	GD(18)=GD(19)	2.36E+10	1.3	25612.7
139.	GD(19) = isope + ic4h7v	5.93E+11	0.8	44528.9
140	GD(19) + ho2 = ic3h5cho+but3m1dt+oh	4 50E+12	0 0	0.0
1 / 1	CD(20) = CD(21) + i a 2b 6 co	1 105+12	1 0	54033 3
141.	GD(20) = GD(21) + 1CONOCO	4 700+12	1.0	01007 0
142.	GD(21)=c3n4-p+c3n5-a	4./ZE+13	0.2	21897.3
143.	F5(9) = S(306)	6.39E+19	-1.8	22481.8
144.	F5 (9) =S (33)	9.18E+11	0.4	16522.2
145.	F5(9)=S(721)	1.10E-01	4.2	21839.3
146.	S(33)=co+C9H15(38)	4.65E+17	-1.2	16546.1
147.	S(306) = c2h4 + S(260)	2.43E+13	0.1	27882.9
148	S(260) = ch3 + c7H80(583)	3 12E+12	0 5	28006 4
1/9	S(260) = S(582)	3 245+09	1 4	28084 5
150	S (260) - S (362)	2 020102	1 6	20154.3
150.	3 (200) - GD (20)	2.036+02	1.0	20134.3
151.	C9H15(41)=C9H15(38)	2.32E+36	-8.1	15327.0
	Rate coefficients at P= 1.00E-01(atm)	6.696E+42	-10.8	14880.0
	Rate coefficients at P= 1.00E+00(atm)	4.075E+40	-9.7	15285.0
	Rate coefficients at P= 1.00E+01(atm)	2.318E+36	-8.1	15327.0
	Rate coefficients at P= 1.00E+02(atm)	7.938E+21	-3.5	10255.0
152.	C9H15(38)=C9H15(392)	1.60E+07	2.1	20679.5
153	C9H15(392) = c2h(+CD(22))	2 095+13	0 1	36085 2
150.	CD(22) = c2h4 c2h4 c2z	2.00ET10	1 1	26102 E
154.	GD (22) = C3114 - A+1C4117V	0.0000+10	1.1	30102.3
155.	GD(22b1s)=c2n3+1sope	2.5/E+11	0.9	45027.9
156.	GD(22bis)+ho2=c3h5-a+ic3h5cho+oh	4.50E+12	0.0	0.0
157.	GD(22)+o2=ch2o+co+but3m1dt	4.60E+16	-1.4	1010.0
158.	C9H15(41)=c3h4-a+GD(23)	5.21E+15	-0.3	55103.4
159.	GD(23)=c2h4+ic4h7v	5.13E+10	1.0	35946.8
160.	S(582) = co+GD(22)	1.22E+20	-2.1	27286.7
161.	S(721) = GD(24)	2.70E+29	-4.7	24898.5
162	$GD(24) = c^{2}h^{4}+GD(25)$	3 76E+06	0.5	29123 5
± 04.	02(21) 02111(02(20)	0./00/00	0.0	27123.3

163.	GD(25)=S(2293)+but3mldt	1.76E+16	0.3	40143.1
164.	S(721)=GD(26)	1.72E+20	-2.3	11088.4
165.	GD(26) = i c 3h 6 c o + GD(27)	2.27E+15	0.2	54272.0
166	CD(27) = c3b4 - a + c3b5 - a	8 105+08	1 3	19163 3
100.		1 (30,100	1.5	10103.5
10/.	n+1C3n5C0=1C3n6C0	1.03E+13	0.3	0.0
	Declared duplicate reaction			
168.	h+ic3h5co=ic3h6co	1.63E+13	0.3	0.0
	Declared duplicate reaction			
169.	ch3+s(2244)=ic3h6co	2.49E+14	-0.5	0.0
170	bo2+ic3b5co-o2+ic3b6co	2 975-01	3 0	19605 0
171		2.J/E 01	2.2	4217 0
1/1.	n+1C3N6C0=n2+1C3N5C0	6.IUE+03	3.2	4317.0
172.	o+ic3h6co=oh+ic3h5co	1.58E-02	4.3	11251.0
173.	oh+ic3h6co=h2o+ic3h5co	1.21E+01	3.7	-1280.0
174.	ho2+ic3h6co=h2o2+ic3h5co	3.47E-03	4.7	9780.0
175.	ch3+S(2293)=ic3h5co	1.40E+05	2.1	8.1
176	h + C7H80(583) = h20 + C7H70s	2 68E+01	3 5	-524 8
177	oh+C7480(583)-h2o+C7470m	6 045+00	37	_1290_0
170		8.04E+00	3.7	-1200.0
1/8.	C/H/OS=GD(28)	8.88E+06	0.9	58155.8
179.	GD(28)=co+GD(29)	7.07E+20	-2.1	31749.3
180.	GD(29)=c3h3+c3h4-p	9.40E+14	1.5	27330.1
181.	C7H7Om=GD(30)	2.01E+03	1.3	30469.2
182	GD(30) = S(2293) + ic4h5	4 91E+14	2 0	53226 1
183	C7H7Om=GD(31)	2 02E+07	0.6	40591 5
100.	CP(21) = cP(22)	1 222120	2 1	27206 0
104.	GD (31) -COTGD (32)	1.226+20	-2.1	27200.0
182.	GD(32) = c3h3 + c3h4 - p	1.24E+11	2.3	15332.9
186.	dipco-2d4j=dipco-24d+h	4.64E+16	-0.5	48705.0
187.	dipco-2d4j=ic3h6co+c3h5-t	2.16E+15	0.2	51873.0
188.	dipco-24d+oh=>dipco-24dj+h2o	1.21E+01	3.7	-1280.0
189.	dipco-24di=c3h5-t+co+c3h4-a	1.41E+11	1.1	50375.0
190	$F_{6}(7) = S(32)$	8 75E+18	-1 2	28947 0
101	$E_{C}(7) = C(205)$	2 70E 12	0 1	26020 0
191.	F0(7)-5(303)	5.70ETIS	0.1	20039.0
192.	$F_{0}(7) = 2S(10) + Cn3$	9.25E+13	-0.1	28702.0
193.	S(32)=S(566)	1.94E+05	2.5	32051.0
194.	S(32)=ZS(6)	4.42E+02	3.0	25145.7
195.	S(566)=c6h10-14d4m+ic3h5co	7.71E+10	0.9	21528.0
196.	S(566)=dipco-24d+c3h5-a	9.45E+13	-0.2	18863.0
197.	S(566) = ZS(22) + ch3	5.39E+13	0.0	28007.0
100	75(6) = dip co = 2/d + c 3h 5 = 2	1 295+17	-0.6	31034 0
100.	$23(0) - \alpha_{1} p c 0 24 \alpha_{1} c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	2 000110	1 2	16546 1
199.	S(305) = 2S(7) + CO	3.89E+18	-1.2	16546.1
200.	2S(7) = 2S(8)	8.19E+0/	1./	26190.0
201.	ZS(7)=ZS(9)	3.06E+03	3.0	29223.0
202.	ZS(8)=isope+ic4h7	1.27E+12	0.6	29288.7
203.	ZS(9)=isope+ic4h7	1.67E+10	0.8	18770.1
204.	ZS(11) = ZS(12)	3.30E+42	-7.9	42876.0
205	7S(12) = 7S(13)	A 52E+11	0.3	23268 0
205.	20(12) - 20(13)	G 22E 10	0.0	57569 0
200.	25(15)=05110=1240+05115=0+00	0.32E+10	-0.2	57500.0
207.	ch3+oh=ch2(s)+h2o	4.38E+14	-0.5	2931.7
	Rate coefficients at P= 1.32E-03(atm)	1.132E+14	-0.5	-496.3
	Rate coefficients at P= 1.32E-02(atm)	2.234E+14	-0.5	-220.4
	Rate coefficients at P= 1.32E-01(atm)	1.160E+15	-0.7	600.5
	Rate coefficients at P= 1.32E+02(atm)	6.091E+10	0.6	2922.8
208	$ch_{3+oh}=h_{2+ch_{2o}}^{2+oh}$	2 198+12	-0.4	3/15 /
200.	$D_{\text{res}} = 1.20 \text{ m}^{-1} 20 \text{ m}^{-1} 20 \text{ m}^{-1} $	2.100112	0.4	1000 7
	Race COEFFICIENTS at P= 1.32E-U3(atm)	3.88/11+09	0.3	-1220./
	Kate coefficients at P= 1.32E-02(atm)	1.988E+10	0.1	-624.4
	Rate coefficients at P= 1.32E-01(atm)	2.815E+11	-0.2	498.3
	Rate coefficients at P= 1.32E+02(atm)	2.360E+09	0.5	3791.0
209.	ch3+oh=ch2oh+h	5.53E+11	0.5	5443.5
	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	1.012.00		20100.0	
216	$c^{2h}_{2h} = c^{2h}_{2h} + c^{2h}_{2h}$	10000100	6 64E+15	-1 2	1429 0	
	Declared duplicate	reaction	0.012/10		1120.0	
217	c2h3+o2=ch2choo	10000101111	4 16E+48	-11 2	16000 0	
211.	Declared duplicate	reaction	1.101/10	11.2	10000.0	
218	c2h3+o2=ch2choo	icacción	3 48E+28	-5.4	3636 0	
210.	Declared duplicate	reaction	5.101.20	5.1	5050.0	
219	$c^{2}h^{3}+o^{2}=c^{2}h^{2}+h^{2}c^{2}$	reaction	1 318+11	0 1	5872 0	
219.	Declared duplicate	reaction	1.010.11	0.1	5072.0	
220	c2b3+c2-c2b2+bc2	reaction	5 492+00	2 1	05 7	
220.	Declared duplicate	reaction	J.40E+00	5.1	05.7	
221	ablabalal cablaalb	10001	7 055107	16	25200 0	
221.	ch2cho+o2<=>ch2cho+o2<=>ch2cho+o2	102 N+ob	9 05E+07	-0.6	10120 0	
222.		-011	0.9JETIJ	-0.8	7124.0	
223.	c3n4-p+n=c2n2+cn3		1.728+14	-0.0	14754.0	
224.	C3n4-a+n=C2n2+Cn3		1.085+10	-0.6	14/54.0	
2.0 F	Declared duplicate	reaction	2 21 1 00	1 1	00000	
225.	c3n4-a+n=c2n2+cn3		3.316+08	1.1	8886.0	
000	Declared duplicate	reaction	6 007 40	0 7	00561 0	
226.	C2n2+cn3=c3n5-s		6.UZE+43	-9.7	20561.0	
007	Declared duplicate	reaction	0.007.00	7 0	10057 0	
227.	C2n2+cn3=c3n5-s		3.03E+32	-/.0	12357.0	
	Declared duplicate	reaction	4 707 40	10.0	00005 0	
228.	c3n4-a=c3n4-p		4./9E+48	-10.0	88685.0	
229.	c3h4-a+h=c3h5-t		/.95E+51	-11.8	18286.0	
	Declared duplicate	reaction	0 505.05			
230.	c3h4-a+h=c3h5-t		2.59E+35	-/.6	/14/.0	
	Declared duplicate	reaction	0 000 00		00511	
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
0.2.0	Declared duplic	ate reaction		4 075.00		7410 0
239.	c3n5-a+c3n5-a=c.	3n4-a+c3n6		4.07E+28	-5.5	7410.0
240.	Doglarod duplic	Z		J.03E+33	=12.2	22970.0
2/1	c3h6+oh=proloh=	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2		/ 28F+/1	-03	8921 0
271.	Declared duplic	rate reaction		4.205141	5.5	0521.0
242	c3h6+oh=pro2oh=	1		5 03E+53	-12 2	22976 0
272.	Declared duplic	ate reaction		J.05E155	12.2	22570.0
243	c3h6+oh=pro2oh=	1		4 28E+41	-93	8921 0
210.	Declared duplic	ate reaction		1.202.11	5.0	0022.0
244.	c3h6+oh=proloh2c	l+h		1.25E+23	-2.7	20993.0
	Declared duplic	ate reaction				
245.	c3h6+oh=proloh2c	l+h		3.66E+05	2.1	10410.0
	Declared duplic	ate reaction				
246.	c3h6+oh=c2h3oh+c	ch3		2.27E-02	4.0	1952.0
	Declared duplic	ate reaction				
247.	c3h6+oh=c2h3oh+c	ch3		2.42E+19	-1.7	13107.0
	Declared duplic	ate reaction				
248.	c3h6+oh=proloh1c	l+h		4.51E+19	-1.9	15763.0
	Declared duplic	cate reaction				
249.	c3h6+oh=proloh1c	l+h		3.40E-02	3.9	4390.0
	Declared duplic	ate reaction				
250.	c3h6+oh=pro2oh1c	1+h		1.47E-05	4.8	2168.0
051	Declared duplic	cate reaction		0 647 15	0.0	10700 0
251.	C3n6+on=pro2on10	1+n		2.64E+15	-0.8	12/28.0
252	Declared duplic	cate reaction		E 10E 10	0 1	10050 0
252.	Doglarod duplic	ato reaction		J.13E+10	-2.1	12559.0
253	c3h6+ob=cb3cbo+c	sh3		7 598-06	1 5	-680 0
255.	Declared duplic	rate reaction		7.551 00	7.5	000.0
254	c3h6+h=c2h4+ch3			4 38E+15	-0.5	7824 4
255	c2h3+c2h2=c4h4+h	n		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+h2c	cc		6.30E+25	-3.3	10014.0
263.	ic4h3+h=c2h2+h2c	cc		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.	0+n20<=>on+on			2.9/E+U6	2.0	13400.0
2/1.	n2+M<=>n+n+M	Tuber and her	0 5000000	4.58E+19	-1.4	104400.0
	11Z h2o	Enhanced by	2.300E+00 1.200E+01			
	0	Enhanced by	1 900E+00			
	co2	Enhanced by	3.800E+00			
	he	Enhanced by	8.300E-01			
272.	0+0+M<=>02+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			

	CO	Enhanced by	1.900E+00			
	co2	Enhanced by	3.800E+00			
	he	Enhanced by	8.300E-01			
27	3. o+h+M<=>oh+M			4.71E+18 ·	-1.0	0.0
	h2	Enhanced by	2.500E+00			
	h2o	Enhanced by	1.200E+01			
	ar	Enhanced by	7.500E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	co2	Enhanced by	2.000E+00			
	he	Enhanced by	7.500E-01			
27	4. $h+oh+M \le h2o+M$	-		3.50E+22 ·	-2.0	0.0
	h2	Enhanced by	7.300E-01			
	h2o	Enhanced by	3.650E+00			
	ar	Enhanced by	3.800E-01			
27	5. h+o2(+M)<=>ho2(-+M)		4.65E+12	0.4	0.0
	Low pressure li	Lmit: 0.17370	E+20 -0.12300E+01	0.00000E+00		
	TROE centering:	0.67000	E+00 0.10000E-29	0.10000E+31	0.10000E	2+31
	h2	Enhanced by	z 1.300E+00			
	 CO	Enhanced by	7 1.900E+00			
	co2	Enhanced by	7 3 800E+00			
	h20	Enhanced by	7 1 000E+01			
	ar	Enhanced by	0 000E+00			
	he	Enhanced by	0 000E+00			
27	(+2r) < ->b > 2	(tor)	0.0002.000	4 652+12	0.4	0 0
27	Low pressure 1	(+a1) imit· 0 68100	E+19 -0 12000E+01	4.03E+12 0.00000E+00	0.4	0.0
	Low pressure lin	nit: 0.91920	E+19 - 0.12000E+01	0.00000E+	00	
	TROF centering.	0 59000	E+00 0 10000E-29	0 10000F+	31 0 10	0005+31
278	holth concering.	0.55000	DIGO 0.100000 23	7 0.1000001 7 0.85±13	0.10	295 0
270.	h01=02+11<=>011+011			F 100115	0.0	293.0
279.	112+02<=>11+1102			3.16E+U3	2.4	55502.0
280.	noz+o<=>on+oz			3.25E+13	0.0	0.0
281.	ho2+oh<=>h2o+o2			1.93E+20	-2.5	584.0
	Declared duplica	ate reaction.	••			
282.	ho2+oh<=>h2o+o2			1.21E+09	1.2	-1307.0
	Declared duplica	ate reaction.				
283.	ho2+ho2<=>h2o2+o	2		1.30E+11	0.0	-1630.0
	Declared duplica	ate reaction.				
284.	ho2+ho2<=>h2o2+o	2		4.13E+14	0.0	12000.0
	Declared duplica	te reaction				
285	$h^{2}o^{2}(+M) \leq b^{2}o^{2}(+M)$	(+M)	••	2 00F+12	0 9	48749 0
200.		.('II)	R+25 -0 22000R+01	0 10710E+	0.5	10/10.0
	now pressure iii		E125 -0.25000E101	0.4074951	21	
	TRUE centering:	0.43000	JE+00 0.10000E-29	0.10000E+	31	
	n20	Ennanced by	0.000±+00			
	he	Enhanced by	0.000E+00			
	ar	Enhanced by	0.000E+00			
	co2	Enhanced by	1.600E+00			
	02	Enhanced by	1.200E+00			
	h2o2	Enhanced by	7.700E+00			
	h2	Enhanced by	3.700E+00			
	CO	Enhanced by	2.800E+00			
286	$h^{2} \cap 2(+h^{2} \cap) < = > \cap h^{+}$	oh (+h2o)		2 00E+12	09	48749 0
200.	Tow prossure lin	186601	F+26 -0 23000F+01	0 /87/00+	0.5	10/10.0
	TOW Pressure III		100 0 10000E+UI	0.40/495+	0J 01	
007	TRUE Centering:	0.01C.U	DE+00 0.10000E-29	> U.IUUUUE+	21	40740 0
287.	n2o2(+ne)<=>oh+c	n(+ne)		2.006+12	0.9	48/49.0
	Low pressure lin	nit: 0.160901	E+25 -0.23000E+01	0.48749E+	05	
	TROE centering:	0.37000)E+00 0.10000E-29	0.10000E+	31	
288.	h2o2(+ar)<=>oh+c	h(+ar)		2.00E+12	0.9	48749.0

289. 290. 291. 292.	Low pressure li TROE centering: h2o2+h<=>h2o+oh h2o2+h<=>h2+ho2 h2o2+o<=>oh+ho2 h2o2+o<=>oh+ho2 h2o2+oh<=>h2o+ho	mit: 0.24900E+2 0.42000E+	5 -0.23000E+01 00 0.10000E-29	0.48749E+05 0.10000E+31 2.41E+13 2.15E+10 9.55E+06 1.74E+12	0.0 1.0 2.0 0.0	3970.0 6000.0 3970.0 318.0
293.	h2o2+oh<=>h2o+h	p2		7.59E+13	0.0	7269.0
294. 295.	Declared duplic co+ho2=co2+oh co+o+m=co2+m	ate reaction		1.15E+05 2.83E+13	2.3 0.0	17550.0 -4540.0
	h2o h2 co co2 ch4 c2h6 ar	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	1.625E+01 2.500E+00 1.875E+00 3.750E+00 1.625E+01 1.625E+01 7.500E-01			
296. 297.	co+o2=co2+o co+oh=co2+h			2.53E+12 7.05E+04	0.0 2.1	47700.0 -276.2
298.	Declared duplic co+oh=co2+h	ate reaction		5.76E+12	-0.7	331.8
299. 300.	Declared duplic co+h2o2=hoco+oh hco+m=h+co+m	ate reaction		3.60E+04 3.61E+13	2.5	28660.0 15344.2
	h2o h2 co co2 ch4 c2h6 n2	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	1.625E+01 1.900E+00 1.875E+00 3.750E+00 1.625E+01 1.625E+01 1.500E+00			
301. 302. 303. 304. 305. 306. 307. 308. 309.	hco+oh=co+h2o hco+o=co+oh hco+o=co2+h hco+h=co+h2 hco+hc2=co2+oh2 hco+hc2=cc2+oh+1 hco+hco=ch2o+co hco+hco=h2+co+co ch2o+M=hco+h+M co	n Enhanced by Enhanced by	1.500E+00 3.000E+00	1.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 7.22E+13 7.58E+12 3.00E+13 1.81E+13 3.00E+12 3.30E+39	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 -6.3	0.0 0.0 0.0 410.0 0.0 0.0 0.0 100000.0
310.	h2 h2o ch2o+M=co+h2+M co ch2o h2	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	2.000E+00 1.200E+01 1.500E+00 3.000E+00 2.000E+00	3.10E+45	-8.0	97600.0
311. 312. 313. 314. 315.	n20 ch20+oh=hc0+h20 ch20+h02=hc0+h20 ch20+o=hc0+oh ch20+h=hc0+h2 ch20+h=hc0+h2	binnanced by	1.200E+01	7.82E+07 1.88E+04 1.81E+13 5.11E+07 1.36E+23	1.6 2.7 0.0 2.2 -2.4	-1055.0 11520.0 3088.0 11524.0 17518.7
316.	Declared duplic ch2o+h=hco+h2 Declared duplic	ate reaction ate reaction		1.64E+15	-0.4	5682.4

317.	ch2o+o2=hco+ho2			8.07E+15	0.0	53420.0
318.	oh+ch2o=hoch2o			6.32E+06	1.6	4284.0
319.	hcooh+h=hoch2o			2.50E+05	2.4	9783.0
320.	hcooh=hco+oh			4.59E+18 ·	-0.5	103300.0
321.	hcooh=hoco+h			1.00E+17	0.0	97000.0
322.	hcooh(+M)<=>co+h	n2o(+M)		7.49E+14	0.0	68710.0
	Low pressure lin	nit: 0.75090E+3	36 -0.51410E+01	0.75379E+05		
	TROE centering:	0.65800E+	00 0.39995E+07	0.18200E+02	0.6239	4E+11
	ar	Enhanced by	7.000E-01			
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	CO	Enhanced by	2.000E+00			
	co2	Enhanced by	3.000E+00			
	c2h6	Enhanced by	3.000E+00			
	ch3oh	Enhanced by	3.000E+00			
323.	hcooh(+M)<=>co2+	+h2(+M)		4.46E+13	0.0	68240.0
	Low pressure lin	mit: 0.37940E+3	37 -0.55990E+01	0.73825E+05		
	TROE centering:	0.83200E+	00 0.63888E+08	0.15600E+02	0.5111	L6E+11
	ar	Enhanced by	7.000E-01			
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	Cn4	Ennanced by	2.000E+00			
	co	Enhanced by	2.000E+00			
	coz	Enhanced by	3.000E+00			
	ch3oh	Enhanced by	3.000E+00			
324	hcooh+o2=ho2+hoc		5.0001100	1 00E+12	0 0	49700 0
325	hcooh+o2=ho2+hco	2		1 00E+12	0.0	56000 0
326	hcooh+h=h2+hco2	2		4 24E+05	23	14091 0
327	hcooh+h=h2+hoco			2 30E+02	3 3	4858 0
328	hcooh+oh=h2o+hco	2		4.90E-05	4.9	-5067.0
329.	hcooh+oh=h2o+hod	20		7.80E-06	5.6	-2365.0
330.	hcooh+ho2=hco2+h	1202		3.90E+01	3.1	25206.0
331.	hcooh+ho2=h2o2+h	1000		4.70E-01	4.0	16787.0
332.	hcooh+ch3=ch4+hc	oco		5.81E+01	3.4	11379.0
333.	hcooh+ch3=ch4+hc	202		2.11E+01	3.2	12084.0
334.	hoco(+M) <=>oh+co	o (+M)		1.19E+14	0.1	36463.0
	Low pressure lin	mit: 0.13710E+	26 -0.23960E+01	0.37483E+05		
	TROE centering:	0.50000E+	00 0.11204E+04	0.11204E+04	0.1720)3E+04
	ar	Enhanced by	7.000E-01			
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	CO	Enhanced by	2.000E+00			
	co2	Enhanced by	3.000E+00			
	c2h6	Enhanced by	3.000E+00			
	ch3oh	Enhanced by	3.000E+00			
335.	hoco(+M) <=>h+co2	2 (+M)		8.22E+11	0.4	35338.0
	Low pressure 11	mit: 0.595/UE+.	27 -0.31480E+01	0.37020E+05	0 5000	45.04
	INUE Centering:	U.440UUE+	7 000E-01	0.822801+03	0.5290	14 <u>5</u> +04
	a1 h2	Enhanced by	2 000E-01			
	h2o	Enhanced by	6 000E+00			
	ch4	Enhanced by	2 0005+00			
	C0	Enhanced by	2 000E+00			
	co?	Enhanced by	3 0005+00			
	c2h6	Enhanced by	3.000E+00			
			2.2002.00			

	ablab Enhanced by 2 000E100			
336	becoto2=co2tbo2	1 105+10	0 9	127 9
337	h000+02=002+1102	2 //=+15	-0.5	26500 0
557.	Reverse Arrhenius coefficients:	2.44E/13	-0.5	20000.0
338	ch3+oh=ch3oh	1 38E+27	-4 3	3684 8
330.	ch3ch=ch2(s)+b2c	2 265+42	-8.3	101305 6
340	$ch_{3}ch_{(+m)} = ch_{2}ch_{+m} + h_{(+m)}$	2.20E+42 2.69E+16	-0.1	98940 0
540.	Low pressure limit: $0.23400\text{E}+41 = 0.63300\text{E}+01$	0 10310E+06	0.1	50540.0
	TROE centering: 0.77300E+00 0.69300E+03	0.53330E+04	0 10	000E-09
341.	ch3oh+o2=ch2oh+ho2	2.05E+13	0.0	44910.0
342.	ch3oh+o2=ch3o+ho2	2.50E+12	0.0	55000.0
343.	ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2	1.13E+13	0.0	19360.0
344.	ch3oh+oh=ch2oh+h2o	7.10E+06	1.8	-596.0
345.	ch3oh+oh=ch3o+h2o	1.00E+06	2.1	496.7
346.	ch3oh+o=ch2oh+oh	1.63E+13	0.0	5030.0
347.	ch3oh+h=ch2oh+h2	1.55E+06	2.4	5911.0
348.	ch3oh+h=ch3o+h2	5.49E+06	2.1	11133.0
349.	ch3oh+ch2o=ch3o+ch3o	1.55E+12	0.0	79570.0
350.	ch3oh+ch3=ch2oh+ch4	3.57E+11	0.0	8663.0
351.	ch3oh+ch3=ch3o+ch4	4.68E+05	2.3	12764.0
352.	ch2o+h(+m) <=>ch2oh(+m)	5.40E+11	0.5	3600.0
	Low pressure limit: 0.12700E+33 -0.48200E+01	0.65300E+04		
	TROE centering: 0.71870E+00 0.10300E+03	0.12910E+04	0.43	1600E+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			
353.	ch2oh+h=ch2o+h2	2 000112	0 0	
		3.00E+13	0.0	0.0
354.	ch2oh+o2=ch2o+ho2	2.41E+14	0.0	0.0 5017.0
354.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction	2.41E+14	0.0	0.0 5017.0
354. 355.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2	2.41E+14 1.51E+15	0.0	0.0 5017.0 0.0
354. 355.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction	2.41E+14 1.51E+15	0.0 0.0 -1.0	0.0 5017.0 0.0
354. 355. 356.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+oh	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13	0.0 0.0 -1.0 0.0	0.0 5017.0 0.0
354. 355. 356. 357.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+oh=ch2o+ho2	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ch ch2oh+oh=ch2o+ho ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+ho2=ch2o+h2o2	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+ho2=ch3oh+co	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.50E+13 1.20E 01	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+hco=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+hco Parorece Arrhonius coofficients:	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.50E+13 1.29E-01 9.63E+02	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 4.6 2.9	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+o=ch2o+h2o ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+hco=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+hco Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 4.6 2.9 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+o=ch2o+h2o ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+hco=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 4.6 2.9 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+ho2=ch2o+h2o ch2oh+ch2o=ch2oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+h(M)	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.50E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13	$\begin{array}{c} 0.0\\ 0.0\\ -1.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 4.6\\ 2.9\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ \end{array}$	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 0.0 26170.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+oh=ch2o+h2o ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+hc0=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+ch3oh ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0 18700E+26 -0 30000E+01</pre>	2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05	$\begin{array}{c} 0.0\\ 0.0\\ -1.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 4.6\\ 2.9\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ \end{array}$	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 0.0 26170.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+hc0=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2oh=ch2o+ch3oh ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TECE centering: 0.30000E=01 0.18915E+04</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.50E+13 1.20E+13 1.20E+13 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E=02	$\begin{array}{c} 0.0\\ 0.0\\ -1.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 4.6\\ 2.9\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ \end{array}$	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+hc=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+chco Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2oh=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2oh=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2oh=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2oh=ch2o+ch3oh ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3otho2=ch2o+h2o2</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0 4.6 2.9 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0
354. 355. 356. 357. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+o=ch2o+h2o ch2oh+ho2=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o+ch3oh ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+ho2=ch2o+h2o2 ch3o+ho=ch2o+h2o2</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+13	$\begin{array}{c} 0.0\\ 0.0\\ -1.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 4.6\\ 2.9\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0$	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+ho2=ch2o+h2o ch2oh+ch0=ch2o+hco Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+b02=ch2o+h2o2 ch3o+o=ch2o+ch</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.1000E-02 3.00E+11 1.30E+13	$\begin{array}{c} 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 4.6\\ 2.9\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0$	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 366.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+oh=ch2o+h2o ch2oh+ch2=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+h640 ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+ho2=ch2o+h2o ch3o+o=ch2o+h2</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11 1.00E+13 2.00E+13	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0 4.6 2.9 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 367. 368.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+h40 Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+ho2=ch2o+h2o2 ch3o+b=ch2o+h2 ch3o+b=ch2o+h2	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 1.20E+13 1.50E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11 1.00E+13 2.00E+13 9.03E+13	0.0 0.0 -1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 367. 368.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+oh2=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+hc3oh ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+ho2=ch2o+h2o ch3o+o=ch2o+h2 ch3o+o=ch2o+h2 ch3o+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11 1.00E+13 1.30E+13 9.03E+13	-1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 4.6 2.9 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 359. 360. 361. 362. 363. 363. 364. 365. 366. 367. 368. 369.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+oh=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+hc3oh ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+ho2=ch2o+h2o ch3o+o=ch2o+h2 ch3o+o=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch3o+o2=ch2o+ho2	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11 1.00E+13 1.30E+13 2.00E+13 2.20E+10	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0 0.0 0.0 11980.0 1748.0
354. 355. 356. 357. 358. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 367. 368. 369.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+ho2=ch2o+h2o ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+b2=ch2o+h20 ch3o+o=ch2o+h0 ch3o+o=ch2o+h0 Declared duplicate reaction ch3o+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11 1.00E+13 2.00E+13 9.03E+13 2.20E+10	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 4.6 2.9 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0 0.0 0.0 11980.0 1748.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 367. 368. 369. 370.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+oh=ch2o+h2o ch2oh+ch2o=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+ho2=ch2o+h2o2 ch3o+o=ch2o+h2o ch3o+o=ch2o+h2 ch3o+a=ch2o+h2 ch3o+a=ch2o+h2 beclared duplicate reaction ch3o+ch2o=ch3oh+hco	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E+02 3.00E+11 1.00E+13 2.00E+13 2.20E+10 3.42E+05	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 6596.0 13110.0 0.0 26170.0 0.0 0.0 0.0 0.0 11980.0 1748.0 31.2
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 364. 365. 366. 367. 368. 369. 370. 371.	ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+oh=ch2o+ho ch2oh+ch2=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co Reverse Arrhenius coefficients: ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+hc3oh ch3o(+M)=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+hc2=ch2o+h2o2 ch3o+b=ch2o+h2o ch3o+b=ch2o+h2 ch3o+b=ch2o+h2 ch3o+b=ch2o+h2 ch3o+b=ch2o+h2 ch3o+b=ch2o+h2 Declared duplicate reaction ch3o+ch2o=ch3oh+hco ch3o+h2o2=ch3oh+hco	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.50E+13 1.50E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 3.42E+05 3.42E+04	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 364. 365. 368. 369. 370. 371. 372.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+oh=ch2o+h2o2 ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch2o+h4M Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+ho2=ch2o+h402 ch3o+o=ch2o+h2o ch3o+o=ch2o+h02 Declared duplicate reaction ch3o+c2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch3o+c2=ch3oh+hco ch3o+h2o2=ch3oh+hco ch3o+h2o2=ch3oh+hco ch3o+co=ch3+co2</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.50E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11 1.00E+13 2.00E+13 9.03E+13 2.20E+10 3.42E+05 3.42E+04 1.57E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
354. 355. 356. 357. 358. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 367. 368. 369. 370. 371. 372. 373.	<pre>ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+o=ch2o+ho ch2oh+ho2=ch2o+h2o ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+co ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch2oh+ch2o=ch3oh+ch2o ch3o+b=ch2o+h(+M) Low pressure limit: 0.18700E+26 -0.30000E+01 TROE centering: 0.30000E-01 0.18915E+04 ch3o+0=ch2o+h2o ch3o+o=ch2o+h2o ch3o+o=ch2o+h02 Declared duplicate reaction ch3o+c2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch3o+c2=ch2o+ho2 Declared duplicate reaction ch3o+c2=ch3oh+ho2 ch3o+co=ch3o+co2 ch3o+hco=ch3oh+co</pre>	2.41E+13 2.41E+14 1.51E+15 4.22E+13 2.41E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.29E-01 9.63E+03 4.00E+12 4.00E+12 6.80E+13 0.24310E+05 0.10000E-02 3.00E+11 1.00E+13 1.30E+13 9.03E+13 2.20E+10 3.42E+05 3.42E+04 1.57E+13 9.00E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 5017.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 13110.0 0.0 26170.0 11980.0 1748.0 31.2 -2593.8 11804.0 0.0

375.	ch3o+c2h4=ch2o+c	c2h5		1.20E+11	0.0	7000.0
376.	ch3oh+ch3o=ch3oh	3.01E+11	0.0	4070.0		
377.	ch3+ho2=ch4+o2			1.19E+05	2.2	-3022.0
378.	ch3+h(+m)=ch4(+n	n)		1.27E+16	-0.6	383.0
	Low pressure lin	mit: 0.19816E+	34 -0.47600E+01	0.24440E+04		
	TROE centering:	0.78300E+	00 0.74000E+02	0.29400E+04	0.696	00E+04
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	ar	Enhanced by	7.000E-01			
	со	Enhanced by	1.500E+00			
	co2	Enhanced by	2.000E+00			
	ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	c2h6	Enhanced by	3.000E+00			
	he	Enhanced by	7.000E-01			
379.	ch4+h=ch3+h2	-		6.14E+05	2.5	9587.3
380.	ch4+o=ch3+oh			1.62E+06	2.3	7094.0
381.	ch4+oh=ch3+h2o			1.00E+06	2.2	2450.0
382.	ch4+ch2=ch3+ch3			4.30E+12	0.0	10038.0
383.	ch4+ch2(s)=ch3+c	ch3		4.00E+12	0.0	0.0
384.	ch4+ho2=ch3+h2o2	2		4.70E+04	2.5	21002.0
385.	h+ch2(+M)<=>ch3	(+M)		6.00E+14	0.0	0.0
	Low pressure lin	mit: 0.10400E+;	27 -0.27600E+01	0.16000E+04		
	TROE centering.	0 56200E+	00 0 91000E+02	0 58360E+04	0 855	20E+04
	h2	Enhanced by	2 000E+00	0.000002.01	0.000.	202001
	h2o	Enhanced by	6 000E+00			
	ch4	Enhanced by	2 000E+00			
	C0	Enhanced by	1 500E+00			
	co ²	Enhanced by	2 000E+00			
	c2h6	Enhanced by	3 000E+00			
	22110 ar	Enhanced by	7 000E-01			
386	a_{\pm} a_{\pm	(+M)	7.0001 01	1 978+12	0 1	-370 0
500.	Low pressure li	mit. 0 48200E+	26 -0 28000E+01	0 59000E+03	0.4	570.0
	TROF contoring.	0.5700000	00 0 1220000000000000000000000000000000	0.252508+03	0 036	50F+04
	ho centering.	Trhanad hu	2 000EL00	0.233306+04	0.930	J0E+04
	liz h2e	Enhanced by	2.000E+00			
	nzo ah 4	Enhanced by	0.000E+00			
	CI14	Enhanced by	2.000E+00			
	CO	Enhanced by	1.300E+00			
	CO2	Enhanced by	2.00000000			
	C2110	Enhanced by	3.000E+00			
207	at ah3+ha2-ah3a+ah	Elillanced by	7.000E-01	1 0000+12	0.2	-607 5
388	ch3+o=ch2o+b			2 38F+1/	-0.2	/11 3
380.	ch3+o=bco+h2			1 588+14	=0.2	411 3
300.	ch3+o2=ch2o+oh			2 648+00	33	8105 0
301	ch3+o2=ch3o+o			7 55F+12	0.0	28297 0
202	ah2+ah2=a2hE+h			6 04E112	0.0	10600 0
392.		5 ())		0.046+12	0.1	10000.0
595.	Low programs liv	D (TIII) mit・ 0 27200を+1	51 _0 100400+02	2.41E+14 0 /3002E+0/	-0.3	0.0
	TOW pressure in	0.57200E+	00 0 10000E+02	0.430936+04	0 100	0.0101.21
	TROE centering:	0.69000E+	00 0.10000±+06	0.100008+02	0.100	UUE+31
	11Z	Enhanced by	2.000E+00			
	IIZU ah A	Enhanced by	0.000E+00			
	CI14	Enhanced by	2.000E+00			
	CO	Enhanced by	1.JUUE+UU			
	- 21- 6	Ennanced by	3.UUUE+UU			
	0120	Ennanced by	3.UUUE+UU 7.0007.01			
201	at ab3tab3a-ab/tab?	Ennancea by	/.000E-01	2 /10+12	0 0	0.0
394.	ch3+Cli30+Cli4+Cli2	20		2.41E+10	0.0	0.0
290.	CII3+CII20II-CI14+CI	120		2.415712	0.0	0.0

396.	ch3+h=ch2+h2			6.03E+13	0.0	15100.0
397.	ch3+hco=co+ch4			8.48E+12	0.0	0.0
398.	ch3+ch2o=hco+ch	4		3.19E+01	3.4	4312.0
399.	ch2+oh=ch+h2o			1.13E+07	2.0	3000.0
400.	ch2+oh=ch2o+h			2.50E+13	0.0	0.0
401.	ch2+o=co+h+h			5.00E+13	0.0	0.0
402.	ch2+o=co+h2			4.00E+13	0.0	0.0
403.	ch2+h=ch+h2			1.00E+18	-1.6	0.0
404.	ch2+o2=co2+h2			3.45E+11	0.0	1000.0
405.	ch2+o2=co2+h+h			1.60E+12	0.0	1000.0
406.	ch2+o2=co+h2o			1.87E+10	0.0	-1000.0
407.	ch2+o2=ch2o+o			5.00E+13	0.0	9000.0
408.	ch2+o2=hco+oh			4.30E+10	0.0	-500.0
409.	ch2+o2=co+oh+h			8.64E+10	0.0	-500.0
410.	ch2+co2=ch2o+co			1.10E+11	0.0	1000.0
411.	ch2+ch2=c2h2+h2			3.20E+13	0.0	0.0
412.	ch2+ch2=c2h2+h+	h		4.00E+13	0.0	0.0
413.	ch2+ch3=c2h4+h			4.00E+13	0.0	0.0
414.	ch2+ch=c2h2+h			4.00E+13	0.0	0.0
415.	ch2+c2h4=c3h6			4.30E+12	0.0	10038.0
416	ch2+c2h6=ch3+c2	h5		6 50E+12	0 0	7911 0
417	ch2(s) + m = ch2 + m			1 00E+13	0.0	0.0
	h	Enhanced by	0 000E+00	1.002.10	0.0	0.0
	h2o	Enhanced by	0.000E+00			
		Enhanced by	1 875E+00			
	co2	Enhanced by	3 750E+00			
	ch4	Enhanced by	1 625E+01			
	c2h6	Enhanced by	1 625E+01			
	h2	Enhanced by	2 500E+00			
		Ennanced by	2.0002.00			
	ar	Enhanced by	7 500E-01			
418	ar ch2(s)+h=ch2+h	Enhanced by	7.500E-01	2 00E+14	0 0	0 0
418. 419	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+	Enhanced by	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13	0.0	0.0
418. 419. 420	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+ch	Enhanced by h2o +b	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13	0.0	0.0
418. 419. 420. 421	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+b2=ch3+h	Enhanced by h2o +h	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 7.00E+13	0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+h ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch4+h2	Enhanced by h2o +h	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13	0.0 0.0 0.0 0.0	
418. 419. 420. 421. 422.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+b=ch+h2	Enhanced by h2o +h	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h+h ch2(s)+o=co+h2	Enhanced by h2o +h	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h+h ch2(s)+o=co+h+h ch2(s)+o=co+h2	Enhanced by h2o +h	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h+h ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+o=ch2o ch2(s)+o=ch2o	Enhanced by h2o +h h	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h+h ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+oh=ch2o+ ch2(s)+h02=ch20 ch2(s)+h02=cch3	Enhanced by h2o +h h +o otob	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 426. 428	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+ho=ch2o+ ch2(s)+ho2=ch2 ch2(s)+hco2=ch3	Enhanced by h2o +h h +o +oh +oh	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+o=co+h4 ch2(s)+o=co+h4 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+ho2=ch2o+ ch2(s)+h02=ch2o+ ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3+	Enhanced by h2o +h h +o o+oh +hco co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+o2=co+oh ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h+h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+ho2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3	Enhanced by h2o +h +oh o+oh +hco co +b	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.80E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+h2=cch4h ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+h0=2ch20 ch2(s)+h0=2ch30 ch2(s)+h0=2ch31 ch2(s)+ch2=ch31 ch2(s)+ch3=c2h4 ch2(s)+ch3=c2h4 ch2(s)+ch3=c2h4 ch2(s)+ch3=c2h4 ch2(s)+cb3=c2h4 ch2(Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c255	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.80E+13 1.20E+14	$\begin{array}{c} 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0\\ 0.0$	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431.	ar ch2 (s) +h=ch2+h ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +o=co+h2h ch2 (s) +o=co+h2h ch2 (s) +ho=ch2o+ ch2 (s) +ho2=ch30 ch2 (s) +hco=ch3+ ch2 (s) +cch3=c2h4 ch2 (s) +cch4=c3h	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+b	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+14 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 433.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+b2=co+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+h02=ch2 ch2(s)+h2o2=ch3 ch2(s)+ch2o=ch3 ch2(s)+cb3=c2h4 ch2(s)+c2h6=ch3 ch2(s)+c2h6=ch4 ch2(s)+c4h6=ch4 ch2(s)+c	Enhanced by h2o +h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+b	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.80E+13 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+b2=cc+oh ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+b=cc+h4h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+bo2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3 ch2(s)+ch2o=ch3 ch2(s)+ch2=ch4 ch2(s)+c2=ch20 ch	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.80E+14 3.00E+14 3.00E+14	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 431. 432. 433. 434.	ar ch2 (s) +h=ch2+h ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2=cc+oh ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +o=cc+h2 ch2 (s) +ho2=ch3 ch2 (s) +ch2=ch3 ch2 (s) +ch2=ch3 ch2 (s) +ch2=ch3 ch2 (s) +cch3=c2h4 ch2 (s) +c2h6=ch3 ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2h2=c30 ch2 (s) +c2=ch20 ch2 (s) +cc2=ch20 ch2 (s) +cc2(s) +cc2=ch20 ch2 (s) +cc2(s) +cc	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co b4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 3.00E+12 1.60E+14	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435.	ar ch2 (s) +h=ch2+h ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2=cch4h ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +o=co+h2h ch2 (s) +o=co+h2h ch2 (s) +ho=ch2o+ ch2 (s) +ho2=ch3 ch2 (s) +hc0=ch3+ ch2 (s) +ch2=c3h ch2 (s) +ch2=c3h ch2 (s) +cch2=c3h ch2 (s) +ch2=c3h ch2 (s) +ch2=c3h c	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 3.00E+12 1.60E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435. 436.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+ho2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=c3h ch2(s)+c2h=c3h ch2(s)+c2h=ch2 ch2(s)+c2h=ch2 ch2(s)+c2h=ch2 ch2(s)+c2h=ch2 ch2(s)+ch2(s)+ch2	Enhanced by h2o +h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+13 1.20E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.30E+14 1.30E+14 3.00E+12 1.60E+14 3.00E+13 5.70E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 432. 433. 435. 436. 437.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2=ch2+h ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+h02=ch3 ch2(s)+h02=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+c2h4=c3h ch2(s)+c2h2=c3h ch2(s)+c2h2=c3h ch2(s)+c2h2=c3h ch2(s)+c2h2=c3h ch2(s)+c2h2=c3h ch2(s)+c2h2=c3h ch2(s)+c2h2=ch2 ch+o=hc+h ch+b=c+h2	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.80E+14 3.00E+12 1.60E+14 3.00E+13 5.70E+13 1.10E+14	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435. 434. 435. 436. 437. 438. 439.	ar ch2 (s) +h=ch2+h ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +o=co+h+h ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +ho=ch2o+ ch2 (s) +ho2=ch3 ch2 (s) +ch2=ch3 ch2 (s) +ch2=ch3 ch2 (s) +ch3=c2h4 ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2=ch2o+ ch2 (s) +c2=ch2o+ ch2 (s) +c2=ch2o+ ch2 (s) +c2=ch2o+ ch2 (s) +c2=hc2+ ch2 (s) +c2=hc2	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.80E+14 3.00E+12 1.60E+14 3.00E+13 5.70E+13 1.10E+14	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435. 434. 435. 436. 437. 438. 439. 440.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch3+h2 ch2(s)+h=ch3+h2 ch2(s)+o=co3+h2 ch2(s)+o=co3+h2 ch2(s)+h02=ch2 ch2(s)+h02=ch3 ch2(s)+ch3=c2h4 ch2(s)+ch3=c2h4 ch2(s)+c2h4=c3h ch4)=c3h	Enhanced by h2o +h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.80E+14 3.00E+12 1.60E+14 3.00E+13 1.10E+14 1.00E+13 1.00E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	
418. 419. 420. 421. 422. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 432. 433. 435. 436. 437. 438. 439. 439. 439.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+b=ch+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+o=co+h2 ch2(s)+ho2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3 ch2(s)+hc2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=c3h ch2(s)+c2h=c3h ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch2(s)+c2h=ch3 ch4)=ch4) ch+02=bc0+ch3 ch4)=ch4) ch+02=bc0+ch3 ch4)=ch4) ch+02=bc0+ch3 ch4)=ch4) ch+02=bc0+ch3 ch4)=ch4) ch+02=bc0+ch3 ch4)=ch4)	Enhanced by h2o +h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.80E+14 3.00E+12 1.60E+14 3.00E+13 1.10E+14 1.00E+13 3.40E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 432. 433. 434. 435. 436. 437. 438. 439. 430. 439. 430. 439. 439. 439. 439. 439. 439. 439. 439	ar ch2 (s) +h=ch2+h ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +o=co+h+h ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +h02=ch3 ch2 (s) +h02=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +c2h2=c3h ch2 (s) +c2h2=c2h2 ch2 (s) +c2h2 ch2 (s) +c2h2	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.30E+14 1.30E+14 3.00E+12 1.60E+14 3.00E+13 1.10E+14 1.00E+13 1.00E+13 3.40E+12 1.71E+12	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435. 434. 435. 436. 437. 438. 439. 440. 441.	ar ch2 (s) +h=ch2+h ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +ho=ch2o= ch2 (s) +ho2=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +cch4=c3h ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2e=ch2o= ch2	Enhanced by h2o +h h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 3.00E+13 5.70E+13 1.10E+14 1.00E+13 3.40E+12 1.71E+13 6.00E+13		0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435. 436. 437. 438. 439. 439. 440. 441. 442.	ar ch2 (s) +h=ch2+h ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2o=ch2+ ch2 (s) +h2=ch3+h ch2 (s) +h=ch+h2 ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +o=co+h2 ch2 (s) +o2=ch3 ch2 (s) +h2o2=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +ch2o=ch3 ch2 (s) +ch3=c2h4 ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2h4=c3h ch2 (s) +c2h2=ch3 ch2 (s) +c2h2=ch2 ch4o=hc0+h ch+o2=hc0+h ch+c02=hc0+co ch+c02=hc0+co ch+ch4=c2h4+h ch+ch4=c2h4+h ch+ch4=c2h4+h	Enhanced by h2o +h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.30E+14 3.00E+13 5.70E+13 1.10E+14 1.00E+13 1.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13		0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
418. 419. 420. 421. 422. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 432. 433. 432. 433. 435. 436. 437. 438. 439. 440. 443. 442.	ar ch2(s)+h=ch2+h ch2(s)+h2o=ch2+ ch2(s)+h2=ch3+h ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+h=ch+h2 ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+o=co+h2h ch2(s)+ho2=ch3 ch2(s)+h02=ch3 ch2(s)+ch2o=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+ch2=ch3 ch2(s)+c2h4=c3h ch2(s)+c2h2=ch4 ch2(s)+c2h2=ch4 ch2(s)+c2h2=ch4 ch2(s)+c2h2=ch4 ch2(s)+c2h2=ch4 ch4)=ch4)=ch4) ch+c2=hc0+co ch+c2=hc0+co ch+ch3=c2h3+h ch+ch3=c2h3+h ch+ch3=ch3+h	Enhanced by h2o +h +oh o+oh +hco co +h +c2h5 5-a+h 3+h +co h4+co	7.500E-01	2.00E+14 3.00E+13 7.00E+13 3.00E+13 1.50E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 1.20E+12 1.80E+13 1.20E+14 1.30E+14 1.30E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+13 1.10E+14 1.00E+13 1.00E+13 3.40E+12 1.71E+13 6.00E+13 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+13 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+13 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+14 3.00E+13 3.40E+14 3.00E+13 3.40E+14 3.00E+13 3.00E+		0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0

446.	c+oh=co+h			5.00E+13	0.0	0.0
447.	c+o2=co+o			1.20E+14	0.0	3990.0
448.	ch3+o2(+m)=ch3o2	(+m)		7.81E+09	0.9	0.0
	Low pressure lim	nit: 0.68500E+	-25 -0.30000E+01	0.00000E+00		
	TROE centering:	0.6000E-	+00 0.10000E+04	0.70000E+02	0.17	000E+04
449.	ch3o2+ho2=ch3o2h	+02		2.47E+11	0.0	-1570.0
450.	ch3o2+ch2o=hco+c	h3o2h		1.99E+12	0.0	11660.0
451.	ch3o2+ch4=ch3+ch	3o2h		1.81E+11	0.0	18480.0
452.	ch3o2+ho2=ch2o+h	20+02		1.80E+10	0.0	-1431.0
453.	ch3o2+ho2=ch3oh+	0+02		1.34E+11	0.0	0.0
454.	ch3o2+ch3o2=ch3o	h+ch2o+o2		1.34E+11	0.0	0.0
455.	ch3o2+ch3o2=ch3o	+ch3o+o2		4.46E+11	0.0	1030.0
456.	ch3o2+ch3=ch3o+c	h3o		5.06E+12	0.0	-1411.0
457.	ch3o2+oh=ch3oh+o	2		6.03E+13	0.0	0.0
458.	ch3o2+h=ch3o+oh			9.60E+13	0.0	0.0
459.	ch3o2+h=ch4+o2			2.11E+10	1.0	16600.0
460.	ch3o2+h2o2=ch3o2	h+ho2		2.41E+12	0.0	9936.0
461.	ch3o2+o=ch3o+o2			3.61E+13	0.0	0.0
462.	ch3o2+ch3o=ch3o2	h+ch2o		3.01E+11	0.0	0.0
463.	ch3o2+ch2oh=ch2o	+ch3o2h		1.21E+13	0.0	0.0
464.	ch3o2+h2=ch3o2h+	h		3.01E+13	0.0	26030.0
465.	ch3o2h(+m)=ch3o+	oh (+m)		4.05E+19	-1.2	44250.0
	Low pressure lim	nit: 0.38910E+	-43 -0.75020E+01	0.46756E+05		
	TROE centering:	0.83750E-	+00 0.36562E+05	0.49880E+03	0.999	900E+04
466.	ch3o2h+oh=ch3o2+	h2o		1.14E+12	0.0	-380.0
467.	ch3o2h+o=oh+ch3o	2		2.00E+13	0.0	4750.0
468.	ch3o2h+h=ch3o+h2	0		7.30E+10	0.0	1860.0
469.	c2h6+ho2=c2h5+h2	02		2.95E+11	0.0	14940.0
470.	c2h6+ch3o2=c2h5+	ch3o2h		1.94E+01	3.6	17100.0
471.	c2h6+oh=c2h5+h2o			1.61E+06	2.2	741.2
472.	c2h6+o=c2h5+oh			9.99E+08	1.5	5803.0
473.	c2h6+h=c2h5+h2			8.55E+03	3.1	5076.8
474.	c2h6+o2=c2h5+ho2			6.03E+13	0.0	51870.0
475.	c2h6+ch3o=c2h5+c	h3oh		3.02E+11	0.0	7000.0
476.	c2h6+ch3=c2h5+ch	4		3.45E+01	3.4	10390.0
4.1.1.	c2h6+hco=ch2o+c2	h5		2.25E+00	3.7	16930.0
478.	c2h6+ch=c2h5+ch2			1.10E+14	0.0	-260.0
	Reverse Arrheniu	is coefficients	:	3.83E+10	0.6	440.0
4/9.	c2h5+o2=ch3ch2o+	0		1.10E+13	-0.2	2/93/.0
480.	c2h5+ho2=c2h4+h2	02		1./9E+12	0.0	0.0
481.	c2h5+oh=c2h4+h2o			2.41E+13	0.0	0.0
482.	c2h5+oh=>ch3+ch2	o+h		2.41E+13	0.0	0.0
483.	c2n5+o=cn2o+cn3			1.61E+13	0.0	0.0
484.	c2n5+o=cn3cno+n			8.02E+13	0.0	0.0
485.	c2n5+o=c2n4+on			3.1/E+12	0.0	-390.0
486.	c2n5+n=c2n4+n2	4		1.82E+12	0.0	0.0
487.	c2n5+cn3=c2n4+cn	4 21- C		1.14E+12	0.0	0.0
488.	c2n5+c2n5=c2n4+c	2n6		1.40E+12	0.0	0.0
489.	n+c2n5(+m)=c2n6(+m)		5.216+17	-1.0	1580.0
	Low pressure lim	it: 0.19900E+	42 -0.70800E+01	0.66850E+04		
	TROE centering:	U.84220E-	+UU U.12500E+03	U.22190E+04	0.688	320E+04
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	hZo	Enhanced by	6.000E+00			
	co	Enhanced by	1.500E+00			
	COZ	Ennanced by	2.000E+00			
	CD4	Ennanced by	2.UUUE+UU			
400	CZN6	Ennanced by	3.0008+00	1 010114	0 0	0.0
490.	czno+nco=czn6+co			1.218+14	0.0	0.0

491.	c2h5+o2(+m)=c2h5o2(+m)	1.51E+15 -1.0 0.0
	Low pressure limit: 0.32780E+32 -0.49000E+01	0.00000E+00
	TROE centering: 0.00000E+00 0.54000E+03	0.10000E-14 0.10000E+16
492.	c2h5+o2=c2h4o2h	8.84E+37 -9.3 10159.0
493.	c2h5+o2=c2h4o1,2+oh	1.93E+20 -3.1 8636.0
494.	c2h5+o2=ch3cho+oh	1.94E+12 -0.5 7765.0
495.	c2h5o2=ch3cho+oh	2.13E+41 -9.8 45919.0
496.	c2h5o2=c2h4o2h	4.55E+51 -13.3 44125.0
497.	c2h5o2=c2h4o1,2+oh	3.01E+42 -10.0 44609.0
498.	c2h4o2h=ch3cho+oh	3.10E+37 -10.1 28588.0
499.	c2h4+ho2=c2h5o2	1.60E+45 -11.1 21254.0
500.	c2h4+ho2=c2h4o2h	3.38E+16 -2.2 13289.0
501.	c2h4+ho2=c2h4o1,2+oh	1.18E+09 1.0 16673.0
502.	c2h4+ho2=c2h5+o2	9.52E+14 -1.0 16582.0
503.	c2h4o2h=c2h4o1,2+oh	2.69E+32 -6.6 20311.0
504.	c2h4+h(+M) = c2h5(+M)	2.53E+08 1.8 1200.0
	Low pressure limit: 0.2/910E+19 0.00000E+00	0.75500E+03
	TROE centering: 0.76000E+00 0.40000E+02	0.10250E+04
	h20 Enhanced by 1.625E+01	
505	$c^{2h4}(+M) \leq >h^{2}+c^{2h^{2}}(+M)$	8 00E+12 0 4 86770 0
	Low pressure limit: 0.15800E+52 -0.93000E+01	0.97800E+05
	TROE centering: 0.73450E+00 0.18000E+03	0.10350E+04 0.54170E+04
	h2 Enhanced by 2.000E+00	0.100002.01 0.011,02.01
	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	
506.	h+c2h3(+M)<=>c2h4(+M)	6.08E+12 0.3 280.0
	Low pressure limit: 0.14000E+31 -0.38600E+01	0.33200E+04
	TROE centering: 0.78200E+00 0.20750E+03	0.26630E+04 0.60950E+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	
E 0 7	ar Enhanced by /.000E-01	1 21 - 01 4 0 0 0 0
507.	c2n4+on=c2n3+h2o	1.31E-UI 4.2 -860.0
508.	c2n4+on=c2n3on+n	1.94E+08 1.4 /829.0
509.	c2n4+on=cn3cno+n	8.25E+08 I.0 I0507.0
510.	c2n4+o=cn3+nco	D.88E+1/ -1./ 2893.1
512.		0.00ETIZ -0.5 1957.8 0.15E±00 0.0 1724.2
513	$c^{2h}_{+0} = ch^{2}_{+} ch^{2}_{0}$	5.1JETUS U.S 1/24.3 6.28F+06 2.0 2050.3
514	$c^{2h4+o=ch2}c^{2h4}$	1 12E+17 -1 8 3179 2
515	$c^{2h4+h=c^{2h3+h^{2}}}$	1 27E+05 2 8 11650 0
516	$c^{2h4+o2=c^{2h3+ho2}}$	4 00E+13 0 0 61500 0
517	c2h4+c2h4=c2h5+c2h3	5.00E+14 0.0 64700 0
518	c2h4+ch3=c2h3+ch4	9.76E+02 2.9 15148 0
010.	Declared duplicate reaction	2
519.	c2h4+ch3=c2h3+ch4	8.13E-05 4.4 8835.8
	Declared duplicate reaction	

520.	c2h4+ch3o=c2h3+ch3oh			1.20E+11	0.0	6750.0
	Reverse Arrhenius co	efficients:		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=ch2+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(+n	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	0.127	72E+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=hccoh+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 Enha	nced by 6	.000E+00			

549.	c2h2(+M)=h2cc(+m	1) nit: 0 24500E+	16 -0 640005+00	8.00E+14 0.49700E+05	-0.5	50750.0
	h2	Enhanced by	2.000E+00	0.497001103		
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	со	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)=c4	h4 (+M)		3.50E+05	2.1	-2400.0
	Low pressure lin	nit: 0.14000E+	61 -0.12599E+02	0.74170E+04		
	TROE centering:	0.98000E+	00 0.56000E+02	0.58000E+03	0.4164	0E+04

555	. c2h4+ch2(s)=h2c	cc+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 li	.mit: 0.375	00E+	34 -0.48000E+01	0.19000E+0	4	
	TROE centering:	0.646	40E+	00 0.13200E+03	0.13150E+0	4 0.556	560E+04
	h2	Enhanced b	У	2.000E+00			
	h2o	Enhanced b	У	6.000E+00			
	ch4	Enhanced b	У	2.000E+00			
	со	Enhanced b	У	1.500E+00			
	co2	Enhanced b	У	2.000E+00			
	c2h6	Enhanced b	У	3.000E+00			
	ar	Enhanced b	У	7.000E-01			
561	. c2h4o1,2=ch4+cc)			1.21E+13	0.0	57200.0
562	. c2h4o1,2+o2=c2h	1301 , 2+ho2			4.00E+13	0.0	61500.0
563	. c2h4o1,2+h=c2h3	3+h2o			5.00E+09	0.0	5000.0
564	. c2h4o1,2+h=c2h4	l+oh			9.51E+10	0.0	5000.0
565	. c2h4o1,2+o=c2h3	301,2+oh			1.91E+12	0.0	5250.0
566	. c2h4o1,2+ch3=ch	14+c2h3o1,2			1.07E+12	0.0	11830.0
567	. c2h4o1,2<=>ch3+	-hco			3.63E+13	0.0	57200.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	1.01E+04	1.5	-2750.0
568	. c2h4o1,2<=>ch3c	cho			7.41E+12	0.0	53800.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	9.01E+10	0.2	80800.0
569	. c2h4o1,2+oh<=>c	2h3o1,2+h2o			1.78E+13	0.0	3610.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	1.35E+10	0.7	24740.0
570	. c2h4o1,2+h<=>c2	2h3o1,2+h2			8.00E+13	0.0	9680.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	5.71E+09	0.8	15920.0
571	. c2h4o1,2+ho2<=>	c2h3o1,2+h2c	2		1.13E+13	0.0	30430.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	4.67E+11	0.1	20670.0
572	. c2h4o1,2+ch3o=c	2h3o1,2+ch3c	bh		1.20E+11	0.0	6750.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	3.61E+09	-0.9	25480.0
573	. c2h4o1,2+ch3o2<	<=>c2h3o1,2+c	h3o2	?h	1.13E+13	0.0	30430.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	9.08E+12	-0.3	19070.0
574	. c2h4o1,2+c2h5o2	2<=>c2h3o1,2+	-c2h5	jo2h	1.13E+13	0.0	30430.0
	Reverse Arrheni	ius coefficie	ents	:	9.09E+12	-0.3	19080.0
575	. c2h5o2+ch3=ch3c	ch2o+ch3o			8.17E+12	0.0	-906.0
576	. c2h5o2+ho2=c2h5	bo2h+o2			2.29E+11	0.0	-1790.0
577	. c2h5o2+ch2o=c2h	15o2h+hco			1.99E+12	0.0	11660.0
578	. c2h4+c2h5o2=c2h	13+c2h5o2h			2.23E+12	0.0	17190.0
579	. ch4+c2h5o2=ch3+	-c2h5o2h			1.81E+11	0.0	18480.0
580	. ch3o2+c2h5o2=o2	2+ch3o+ch3ch2	20		7.74E+10	0.0	-61.0
581	. c2h5o2+c2h5o2=c	h3ch2o+ch3ch	120+c	2	7.74E+10	0.0	-61.0
582	. c2h5o2+c2h5o2=c	2h5oh+ch3chc	o+o2		1.34E+11	0.0	0.0
583	. c3h6+c2h5o2=c3h	15-a+c2h5o2h			3.24E+11	0.0	14900.0
584	. c2h5o2+c3h8=c2h	1502h+nc3h7			1.70E+13	0.0	20460.0
585	. c2h5o2+c3h8=c2h	1502h+ic3h7			2.00E+12	0.0	17000.0
586	. c4h8-1+c2h5o2=c	:4h713+c2h5o2	2h		1.40E+12	0.0	14900.0
587	. c2h5o2h+o=oh+c2	2h5o2			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	0.344	41E+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
021.	Declared duplicate reaction	0.002 11	0.2	,000.0
622	ch3cho+ch3co3=ch3co+ch3co3h	1 92E+00	36	5641 9
022.	Declared duplicate reaction	1.022.00	0.0	0011.0
623	ch3cho+ch3co3=ch3co+ch3co3h	9 81E-04	4 3	2636 1
020.	Declared duplicate reaction	J.012 01		2000.1
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	$ch_{3}c_{0}+b_{2}=ch_{3}+c_{0}+c_{0}$	3 16F+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+bo2=ch3co3b+o2	1 75E+10	0.0	-3275 0
631	ch3co3h=ch3co2+oh	5 01E+14	0.0	40150 0
UJT.	01500511-015002+011	0.016+14	0.0	-0100.0

622	ab2aa21m-ab21aa21m	4 400116	0.0	10500 0
C22.		1.000.04	0.0	10300.0
634	chiscoz + n= chizco + hizo	1.755.10	0.0	2275 0
034.		1./JETIU	1.0	-3273.0
635.	chiscos=>chisco+hos	3.34ETU9	1.0	32300.0
630.		1.00E+13	0.0	3/400.0
637.	$cn_3co_3+n_02=>cn_3+co_2+o_2+o_1$	1.00E+12	0.0	0.0
638.	cn3co3+cn3o2=>o2+cn3+co2+cn3o	9.00E+11	0.0	0.0
639.	cn3co3+cn3o2=>o2+cn3coon+cn2o	5.00E+11	0.0	0.0
640.	cn3co3+cn3co3=>2co2+2cn3+o2	2.50E+12	0.0	0.0
641.	ch3co+h=ch2co+h2	2.00E+13	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.2/E+09	0.0	83040.0
642.	ch3co+o=ch2co+oh	2.00E+13	0.0	0.0
~	Reverse Arrhenius coefficients:	7.2/E+09	0.0	83040.0
643.	ch3co+ch3=ch2co+ch4	5.00E+13	0.0	0.0
	Reverse Arrnenius coefficients:	7.2/E+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
6//.	ch2cho+ho2=ch2o+hco+oh	1.00E+13	0.0	0.0
678.	ch2cho+oh=ch2co+h2o	1.00E+13	0.0	2000.0
6/9.	ch2cho+h=ch2co+h2	2.00E+13	0.0	4000.0
680.	ch2cho+h=ch3co+h	5.00E+12	0.0	0.0
681.	cn2cno+n=ch3+hco	9.00E+13	0.0	0.0
682.	ch2cho+ch3=>c2h5+co+h	4.90E+14	-0.5	0.0
683.	cn2cno=Cn3CO	1.UUE+13	0.0	4/100.0
684.	cn/cno=ch/co+h	3.46E+36	-6.9	52979.4
685.	$cn_2cn_0=cn_3+co$	2.15E+35	-6.8	4954/.8
086.	$Cn2+CO(+M) \leq Cn2CO(+M)$	8.105+11	0.5	4510.0

	Low pressure lin TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar	hit: 0.26900E+34 -0.51100E+01 0.59070E+00 0.27500E+03 Enhanced by 2.000E+00 Enhanced by 2.000E+00 Enhanced by 1.500E+00 Enhanced by 2.000E+00 Enhanced by 3.000E+00 Enhanced by 7 000E-01	0.70950E+04 0.12260E+04	0.5185	0E+04
587. 588. 590. 591. 592. 593. 594. 595. 596. 597. 598. 599.	ch2co+o2=ch2o+cc ch2co+ho2=>ch2o+ ch2co+h=ch3co ch2co+o=hco+hco ch2co+o=hco+hco ch2co+o=ch2o+co ch2co+o=ch2+co ch2co+o=ch2+co ch2co+o=hcco+ho ch2co+oh=ch2o++c ch2co+oh=ch2o++co+h2 ch2co+oh=ch2o++co+h2co++co+h2co++co+h2co++co+h2co++co+h2co++co+h2co++co+h2co++co++co++co++co++co++co++co++co++co+	2 - 	2.00E+13 6.00E+11 1.00E+14 2.30E+08 1.80E+11 1.80E+11 1.08E+12 1.87E+14 1.00E+12 2.00E+12 1.75E+06 6.98E+18 7.50E+12	0.0 0.0 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	61500.0 12738.0 12300.0 2627.0 1350.0 1350.0 1350.0 1350.0 16690.0 3000.0 -1010.0 1698.8 10046.6
700. 701. 702. 703.	ch2co+ch3=ncco+c ch2co+ch2=c2h4+c ch2co+ch2=hcco+c chocho(+m)=ch2o+ Low pressure lin	n4 :o :h3 :co(+m) nit: 0.89100E+17 0.00000E+00	7.50E+12 1.00E+12 3.60E+13 4.27E+12 0.49200E+05	0.0 0.0 0.0 0.0	0.0 11000.0 50600.0
704. 705. 706. 707. 708. 711. 712. 713. 714. 715. 716. 717. 718. 719. 720. 722. 72. <	chocho(+m)=co+cc Low pressure lin chocho+oh=choco+ chocho+b=choco+ chocho+ho2=choccd chocho+ch3=choccd chocho+ch3=choccd chocho+co=chocho choco+ho2=hco+co choco+co=co+co+ c2h301,2=ch2co+ c2h301,2=ch2co+ c2h301,2=ch3co c2h301,2=ch3co c2h301,2=ch2co+ c2h2oh+o=ch2co+ c2h2oh+o=ch2co+ c2h2oh+o=ch2co+ c2h2oh+o=ch2co+ hcoh+h=ch2co+ hcoch+h=ch2co+ hcoch+h=ch2co+ hcoch+h=ch2co+	<pre>++h2(+m) nit: 0.25700E+17 0.00000E+00 hh2o hh2o hh2o hh co h+h2o2 ++ch4 ++ho2 no2 n 22 h h h2o h2 h h2 h2 h h2 h2 h h2 h</pre>	1.07E+14 0.38400E+05 1.00E+13 7.24E+12 1.70E+12 1.70E+12 1.74E+12 6.30E+13 1.00E+13 2.00E+07 3.98E+12 4.96E+13 7.31E+12 8.51E+14 8.74E+31 5.00E+13 2.00E+13 1.00E+13 4.00E+13 5.00E+13	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	55100.0 0.0 1970.0 0.0 10700.0 8440.0 30000.0 0.0 30000.0 14860.0 14280.0 14280.0 14290.0 28000.0 4000.0 2000.0 -250.0 0.0 0.0
	Low pressure lin TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 co2 c2h6 ar	hit: 0.26900E+29 -0.37400E+01 0.57570E+00 0.23700E+03 Enhanced by 2.000E+00 Enhanced by 2.000E+00 Enhanced by 1.500E+00 Enhanced by 2.000E+00 Enhanced by 3.000E+00 Enhanced by 7.000E-01	0.19360E+04 0.16520E+04	0.5069	00E+04

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	$hcco+hcco=c^2h^2+co+co$	1 00E+13	0.0	0.0
735	hcco+o=cb+co2	2 958+13	0.0	1113 0
736	$hcco+ch^3=c^2h^4+co$	5 00F+13	0.0	1110.0
730.	c2o+o2=co+co+o	2 00E+13	0.0	0.0
720	c2c+cb=cc+cc+b	2.000113	0.0	0.0
720	c20+011-C0+C0+11	2.00E+13 5.00E+13	0.0	0.0
739.		5.00E+13	0.0	0.0
740.		5.00E+13	0.0	0.0
741.	c2+o2=c0+c0	5.00E+13	0.0	0.0
742.	C2+0n=C20+n	5.00E+13	0.0	1000 0
/43.	c2+n2=c2n+n	4.00E+05	2.4	1000.0
/44.	c2n5on=c2n4+n2o	4.60E+32	-5.6	76019.0
745.	c2h5oh=ch3+ch2oh	1.60E+58 -	-12.3	105/08.0
/46.	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	0.11101E+05)	
749.	c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2	2.00E+13	0.0	52800.0
750.	c2h5oh+o2=ch3choh+ho2	1.50E+13	0.0	50150.0
751.	c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o	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	0.16531E+05	5	
	TROE centering: 0.42600E+00 0.30000E+00	0.22780E+04	4 0.10	0000E+06
771.	ch3ch2o+o2=ch3cho+ho2	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

774. 775. 776	ch3ch20+ho2=ch3cho+h2o2 ch3ch20+co=c2h5+co2 ch3chcb+co2=ch3cho+ho2			3.00E+11 4.68E+02	0.0 3.2	0.0 5380.0 1120.0
777.	ch3choh+ch2=c2h3ch+ho2 ch3choh+ch3=c3h6+h2o			8.90E+13 1.00E+13	2.1	470.0
779.	ch3choh+o=ch3cho+oh			1.00E+14	0.0	0.0
780.	ch3choh+h=c2h3oh+h2			3.10E+12	0.3	-334.0
781.	ch3choh+h=c2h4+h2o			9.30E+23	-3.0	7954.0
782.	ch3choh+h=ch3+ch2oh			5.00E+24	-2.9	10754.0
783.	ch3choh+h=c2h5+oh			6.80E+20	-1.9	11331.0
784.	ch3choh+ho2=ch3cho+oh+oh			4.00E+13	0.0	0.0
785.	ch3choh+oh=ch3cho+h2o			5.00E+12	0.0	0.0
/86.	ch3choh(+M)=ch3cho+h(+M)	22002.12	0 000007.00	6.1/E+09	1.3	33775.0
	Low pressure limit: 0.1	7700E+17	0.0000000000000000000000000000000000000	0.20/80E+0	J5 04 0 41	2265105
707	ablabab (IM) = alblab Ib (IM)	0700E+00	0.032006+02	6 26EL00	1 2	220ETUJ
/8/.	Low processing limit. 0.8	100000116	0 0000000000000000000000000000000000000	0.30E+U9	1.3	35970.7
	TROE contoring:	173005+13	0.0000000000000000000000000000000000000	0.213136+0	01 0 26 01	1500+04
788	ch3choh(+M) = ch3+ch2o(+M)	1300E+00	0.100006+02	2 228+09	1 2	33983 7
/00.	Low pressure limit. 0.5	8600E+16	0 00000E+00	0 21330E+0	15	55505.7
	TROE centering: 0.1	2400E+00	0 10000E+01	0.17290E+	04 0 50	0005+05
789.	c2h4+oh=pc2h4oh	1002.00	0.100002.01	6.02E+37	-7.8	10736.0
	Declared duplicate react	ion				
790.	c2h4+oh=pc2h4oh Declared duplicate react	ion		3.02E+26	-4.9	2297.0
791.	pc2h4oh=c2h3oh+h			3.30E+28	-5.3	35583.0
792.	pc2h4oh+o2=c2h3oh+ho2			6.00E+03	-10.0	199.0
	Declared duplicate react	ion				
793.	pc2h4oh+o2=c2h3oh+ho2			4.40E+20	-2.9	8516.0
	Declared duplicate react	ion				
794.	pc2h4oh+o2=o2c2h4oh			5.60E+32	-6.6	5046.0
795.	pc2h4oh+o2=ch2o+ch2o+oh			3.00E+25	-4.5	6763.0
796.	pc2h4oh+h=c2h4+h2o			6.50E+23	-2.9	9307.0
797.	pc2h4oh+h=ch3+ch2oh			2.80E+25	-3.1	12454.0
798.	pc2h4oh+h=c2h5+oh			1.60E+22	-2.3	13261.0
/99.	c2h3oh=c2h3+oh			6.90E+21	-1.6	110/00.0
000	Reverse Arrhenius coeffi	cients:		2.41E+13	0.0	0.0
800.	c2n3on<=>cn2cno+n			3.64E+15	-0.4	95390.0
001	Reverse Arrhenius coerri	cients:		2.40E+13	0.0	12510.0
001. 002	c_{2h}^{2h}			4.426742 5.310±11	-9.1	30930 0
802.	$c^{2h3oh+b2} = c^{2h2oh+h2}$			2 47E+07	2 0	15200.0
804	$c^{2h3oh+ho2}=ch3cho+ho2$			1 70E+07	0.9	6863 0
805	ch2+c3h8=ch3+ic3h7			2 19E+12	0.0	6405.0
806	ch2+c3h8=ch3+nc3h7			1 79E+12	0.0	6405.0
807.	c3h8=nc3h7+h			1.58E+16	0.0	97970.0
808.	c3h8=ic3h7+h			5.00E+15	0.0	94990.0
809.	c3h8(+m) = c2h5 + ch3(+m)			1.55E+24	-2.0	90388.6
	Low pressure limit: 0.4	7690E+78	-0.16670E+02	0.10010E+0	06	
	TROE centering: 0.8	31000E+00	0.30910E+04	0.12800E+	03 0.88	290E+04
	h2 Enhanced	aby 2	.000E+00			
	h2o Enhanced	iby 6	.000E+00			
	ar Enhanced	l by 7	.000E-01			
	co Enhanced	i by 1	.500E+00			
	co2 Enhanced	a by 2	.000E+00			
	ch4 Enhanced	l by 2	.000E+00			
	c2h6 Enhanced	iby 3	.000E+00			
	he Enhanced	iby 7	.000E-01			

810.	c3h8+o2=nc3h7+hc	2	4.00E+1	3 0.0	50872.0
811	c3h8+o2=ic3h7+bc	2	4.00E+1	3 0.0	47500.0
812	c3h8+bo2=pc3h7+b	202	4 76E+0	1 2 5	16494 0
012.	= 2h0 + h = 2 - i = 2h7 + h	2.2.2	/0E10	2.5	12010 0
013.	03118+1102=103117+1	1202	9.041-0.	2.0	13910.0
814.	c3h8+oh=nc3h/+h2	0	2.73E+0	/ 1.8	868.3
815.	c3h8+oh=ic3h7+h2	0	1.98E+0	7 1.8	-63.6
816.	c3h8+o=nc3h7+oh		3.72E+0	5 2.4	5505.0
817.	c3h8+o=ic3h7+oh		5.50E+0	5 2.5	3140.0
818	c3h8+h=nc3h7+h2		1.34E+0	5 2.5	6756.0
819	$c_{3h8+h=ic_{3h7+h2}}$		1 01E+0	1 2 9	2931 0
010.	=2h0+=h2===2h7+=	- 4	2.000.1	2.5	11710 0
820.	210+013=1123117+0		3.00E+1.	2 0.0	11/10.0
821.	c3h8+ch3=1c3h/+c	2h4	8.0/E+1	L 0.0	10110.0
822.	c3h8+c2h5=nc3h7+	-c2h6	3.16E+1	L 0.0	12300.0
823.	c3h8+c2h5=ic3h7+	-c2h6	5.01E+1	0.0	10400.0
824.	c3h8+c2h3=nc3h7+	c2h4	6.00E+0	2 3.3	10502.0
825.	c3h8+c2h3=ic3h7+	c2h4	1.00E+0	3 3.1	8829.0
826.	c3h8+ic3h7=nc3h7	'+c3h8	1.00E+1	0.0	12900.0
827	c3h8+c3h5-a=nc3h	7+c3b6	7 94E+1	0.0	20500.0
027.	albertalbe and a	712266	7.91211	0.0	16200.0
020.	C3118+C3115=a=1C31	-1.2.1	7.94671	1 0.0	10200.0
829.	c3n8+cn30=nc3n/+	-cn3on	3.18E+1	L U.U	/050.0
830.	c3h8+ch3o=ic3h7+	-ch3oh	7.20E+1	0.0	4470.0
831.	nc3h7(+M)=c2h4+c	2h3 (+M)	1.23E+1	3 -0.1	30202.0
	Low pressure lin	nit: 0.54020E+50 -0.10	000E+02 0.35766	E+05	
	TROE centering:	0.21700E+01 0.10	0000E-14 0.25100	E+03 0.11	850E+04
	h2o	Enhanced by 5,000E	-0.0		
	h2	Enhanced by 2 000E	-00		
	202	Enhanced by 2.000E	00		
	02	Elilianced by 5.000E	-00		
000		Enhanced by 2.000E	-00		10010 5
832.	c3h6+h=nc3h/		6.61E+4	2 -9.8	10618./
833.	c3h6+h=ic3h7		3.60E+3	5 -7.0	8724.3
834.	nc3h7=ic3h7		3.56E+1	0.9	37300.0
835.	nc3h7+o2=c3h6+hc	2	2.63E+0) 3.5	2481.2
836.	ic3h7+o2=c3h6+hc	2	4.91E+1	7 -1.7	6964.0
837.	ho2+ic3h7=ic3h7c	2h	4.80E+1	2 0.0	0.0
838	$ho^2+nc^3h^7=nc^3h^7c$	2h	4 80E+1	2 0 0	0.0
839	nc3h7+o2=nc3h7o2)	1 15E+2	-2.4	2451 3
0.00	i=2h7+s2=i=2h7s2		C 74P+2	7 4 0	2770.0
040.	103117+02=10311702	0.1.1	0.746+2	-4.0	3779.0
841.	nc3n/+o2=c3n6o1-	-2+on	3.35E+U.	2 2.6	4697.4
842.	1c3h7+o2=c3h6o1-	2+oh	2.81E+1	3 -2.3	10119.3
843.	nc3h7+h=c2h5+ch3		1.00E+1	1 0.0	0.0
844.	ic3h7+h=c2h5+ch3		5.00E+1	3 0.0	0.0
845.	ic3h7+h=c3h6+h2		3.61E+1	2 0.0	0.0
846.	ic3h7+o=ch3coch3	3+h	4.82E+1	3 0.0	0.0
847.	ic3h7+o=ch3cho+c	h3	4.82E+1	3 0.0	0.0
848	nc3h7+o=ch2o+c2h	5	4.82E+1	3 0.0	0.0
849	nc3h7+o=c2h5chot	-h	4 82E+1	3 0 0	0.0
040.	ab2a2 pa2b7=ab2a	11 una2h7a	1 000011	0.0	1200.0
050.	i=2h7=2+nc3n7=cn3c	-2272	1.90E+1.	2 0.0	-1200.0
851.	1c3n/o2+nc3n/=1c	3n /o+nc3n /o	1.90E+1.	2 0.0	-1200.0
852.	nc3h7o2+nc3h7=nc	3h7o+nc3h7o	1.90E+1	2 0.0	-1200.0
853.	nc3h7+ho2=nc3h7c	0+0h	1.90E+1:	2 0.0	-1200.0
854.	ch3o2+ic3h7=ch3c	+ic3h7o	1.90E+1	2 0.0	-1200.0
855.	ic3h7o2+ic3h7=ic	3h7o+ic3h7o	1.90E+1	2 0.0	-1200.0
856.	nc3h7o2+ic3h7=nc	3h7o+ic3h7o	1.90F+1	2 0.0	-1200.0
857	ic3h7+ho2=ic3h7c	0+0h	1.90E+1	2 0.0	-1200.0
858	ic3h7o2+c2h3cho-	c2h3co+ic3h7o2h	2 805+1	2 0.0	13600 0
950.	ia3h7o2+c2115c110=	21120710211	2.00ETL 1 12mi1	- 0.0	10000.0
000.	10311/02+02114=021		1.136+1	. 0.0	0500.0
800.	LC3N/OZ+C2N5Ch0=	±con/o∠n+c∠h5co	2.UUE+1	L U.U	900.0
0.01					00100 -

060	i a2h7a2 Lah2a-i a2h7a2h Lhaa	E 60E110	0 0	12600 0
002.		J.00E+12	0.0	13600.0
863.	1C3N/02+CN3CNO=1C3N/02N+CN3CO	2.80E+12	0.0	13600.0
864.	1C3n/02+Cn4=Cn3+1C3n/02n	1.126+13	0.0	24640.0
865.	1C3n/02+n2=n+1C3n/02n	3.01E+13	0.0	26030.0
866.	1c3n/o2+cn3on=cn2on+1c3n/o2n	6.30E+12	0.0	19360.0
867.	1C3h/o2+ho2=1C3h/o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1/90.0
868.	ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+ch3ch2o+o2	5.00E+10	0.0	0.0
869.	ic3h7o2+ic3h7o2=o2+ic3h7o+ic3h7o	5.00E+10	0.0	0.0
870.	ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2	5.00E+10	0.0	0.0
871.	ic3h7o2+ch3co3=ic3h7o+ch3co2+o2	5.00E+10	0.0	0.0
872.	ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
873.	ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
874.	ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+ch3ch2o	1.90E+12	0.0	-1200.0
875.	ic3h7o2+c3h5-a=ic3h7o+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
876.	ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
877.	ic3h7o2+h2o2=ic3h7o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0
878.	nc3h7o2+h2o2=nc3h7o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0
879.	nc3h7o2+c2h3cho=c2h3co+nc3h7o2h	2.80E+12	0.0	13600.0
880.	nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h	1.13E+13	0.0	30430.0
881.	nc3h7o2+c2h5cho=nc3h7o2h+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
882.	nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
883.	nc3h7o2+ch3cho=nc3h7o2h+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
884.	nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h	1.12E+13	0.0	24640.0
885.	nc3h7o2+h2=h+nc3h7o2h	3.01E+13	0.0	26030.0
886.	nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h	6.30E+12	0.0	19360.0
887.	nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
888.	nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+ch3ch2o+o2	5.00E+10	0.0	0.0
889.	nc3h7o2+nc3h7o2=o2+nc3h7o+nc3h7o	5.00E+10	0.0	0.0
890.	nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
891.	nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
892.	nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+ch3ch2o	1.90E+12	0.0	-1200.0
893.	nc3h7o2+c3h5-a=nc3h7o+c3h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
894.	nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
895.	nc3h7o2=c3h6+ho2	2.55E+16	-1.2	32480.3
896.	ic3h7o2=c3h6+ho2	1.29E+40	-8.6	39418.6
897.	nc3h7o2=prooh1-2	2.58E+42	-10.3	37670.2
898.	nc3h7o2=prooh1-3	1.01E+00	3.4	18994.8
	Declared duplicate reaction			
899.	nc3h7o2=prooh1-3	1.26E+23	-0.0	75440.7
	Declared duplicate reaction			
900.	ic3h/o2=prooh2-1	4.62E+27	-5.5	35036.7
901.	nc3h/o2=c3h6o1-2+oh	3.28E+21	-2.9	37342.8
902.	ic3h/o2=c3h6o1-2+oh	1.94E+53	-13.0	49382.4
903.	proohl-2=proohl-3	5.36E-85	31.0	535.8
904.	nc3h7o2h=nc3h7o+oh	2.50E+15	0.0	43000.0
905.	1C3h/o2h=1C3h/o+oh	2.50E+15	0.0	43000.0
906.	prooh1-2=c3h6o1-2+oh	1.17E+04	2.7	10759.4
907.	prooh1-3=c3h6o1-3+oh	4.60E+14	-2.0	21242.9
908.	prooh2-1=c3h6o1-2+oh	5.40E+16	-1.6	12694.5
909.	c3h6+ho2=c3h6o1-2+oh	1.92E+12	0.1	17384.8
910.	proohl-2=c3h6+ho2	1.16E-09	7.5	14745.7
911.	proohl-3=c3h6+ho2	1.60E+10	-0.4	1/531.8
912.	proon2-1=c3h6+ho2	5.04E-23	10.5	2465.0
913. 01.1	proon1-2+o2=prooh1-2o2	8.50E+18	-2.5	0.0
914.	proon1-3+02=proon1-302	4.5UE+18	-2.5	0.0
913. 016	prooh1-2o2-c2kct12+ch	7.3UE+1/ 2.5/m 01	-2.5	22000 0
910. 017	proch1-202-c3ket12+ch	2.34E-UI	J./	17200 0
911.	proonr=302-C3Ket13+0H	0.305+04	1.0	1/200.0

918.	prooh2-1o2=c3ke	t21+oh		1.20E+01	3.1	22500.0
919.	c3ket12=ch3cho+	hco+oh		1.00E+16	0.0	43000.0
920.	c3ket13=ch2o+ch	2cho+oh		1.00E+16	0.0	43000.0
921.	c3ket21=ch2o+ch	3co+oh		1.00E+16	0.0	43000.0
922.	c3h6o1-2+h=>h2+	ch3chcho		9.60E+08	1.5	2785.0
923.	c3h6o1-2+h=>h2+	ch3coch2		4.80E+08	1.5	2005.0
924.	c3h6o1-2+oh=>h2	o+ch3chcho		4.80E+06	2.0	-1192.0
925.	c3h6o1-2+oh=>h2	o+ch3coch2		2.40E+06	2.0	-1192.0
926.	c3h6o1-2+ho2=>h	2o2+ch3chcho		8.00E+12	0.0	14400.0
927.	c3h6o1-2+ho2=>h	2o2+ch3coch2		4.00E+12	0.0	13260.0
928.	c3h6o1-3+h=>h2+	pc2h4cho		1.92E+09	1.5	2785.0
929.	c3h6o1-3+oh=>h2	o+pc2h4cho		9.60E+06	2.0	-1192.0
930.	c3h6o1-3+ho2=>h	2o2+pc2h4cho		1.60E+13	0.0	14400.0
931.	c3h6o1-2=c2h5+h	CO		2.45E+13	0.0	58500.0
932.	c3h6o1-2=c2h5ch	0		1.82E+14	0.0	58500.0
933.	$c_{3h6o1-2=ch3+ch}$	- 3co		4.54E+13	0.0	59900.0
934.	c3h6o1-2=ch3+ch	2cho		2.45E+13	0.0	58820.0
935.	$c_{3h6o1-2=ch3+c2}$	h3o1.2		8.00E+15	0.0	92010.0
936	$c_{3h5-a+h(+m)=c_{3}}$	h6(+m)		2 00E+14	0 0	0 0
550.	Low pressure li	mit. 0 13300E+	61 -0 12000E+02	0 59678E+04	0.0	0.0
	TROE centering:	0 20000E-	-01 0 10966E+04	0 10966E+04	0 68	595E+04
	h2o	Enhanced by	6 000E+00	0.100001.01	0.00	000001
	60	Enhanced by	1 500E+00			
	co ²	Enhanced by Enhanced by	2 000E+00			
	ch/	Enhanced by	2.00000+00			
	c2h6	Enhanced by	3 000E+00			
	b2	Enhanced by	2 0005+00			
		Enhanced by	7 000E-01			
937	$c^{2}h^{3}+ch^{3}(+m)=c^{3}$	h6(+m)	,	2 508+13	0 0	0 0
1.11.		110 () 111/		Z	0.0	11 11
	Tow processing li	mit. 0 42700E+5	50 _0 11040F+02	0 076095+04		0.0
	Low pressure li	mit: 0.42700E+5	59 -0.11940E+02	0.97698E+04	0 10	1405+05
	Low pressure li TROE centering:	mit: 0.42700E+5 0.17500E+	59 -0.11940E+02 -00 0.13406E+04	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by	59 -0.11940E+02 -00 0.13406E+04 6.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o co	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 -00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 cb4	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 2.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2b6	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 2.000E+00 2.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 b2	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 2.000E+00 3.000E+00 2.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2b2	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 2.000E+00 2.000E+00 2.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h2	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 c2h4	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
029	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h2 c2h4 ar c2h4-ar	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10	140E+05
938.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3b5=c2h6	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5 40E+02	0.10	80000.0
938. 939.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+ho2=c3h6	mit: 0.42700E+5 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02	0.10	80000.0 -3060.0
938. 939. 940.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+ho2=c3h5 c3h5+a+bo2=c3h5-s+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12	0.10 0.0 2.8 0.0	80000.0 -3060.0 60200.0
938. 939. 940. 941.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+h02=c3h5 c3h6+02=c3h5-s+ c3h6+02=c3h5-s+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0	80000.0 -3060.0 60200.0 60200.0
938. 939. 940. 941. 942.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+ho2=c3h6 c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+ho2=c3h5-s+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2 +h2o2	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0	80000.0 -3060.0 60200.0 12570.0
938. 939. 940. 941. 942. 943.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+ho2=c3h6 c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+ho2=c3h5-s+ c3h6+ho2=c3h5-s+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2 +1202 +1202	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0	80000.0 -3060.0 60200.0 12570.0 9930.0
938. 939. 940. 941. 942. 943. 944.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h5-a+h02=c3h5 c3h6+02=c3h5-s+ c3h6+02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s c3h6+h02=c3h5-s c3h6+h02=c3h5-s	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 +h202 +h202 +h202 bo2	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7	80000.0 -3060.0 60200.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 13547.0
938. 939. 940. 942. 942. 943. 944. 945.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+h02=c3h5 c3h6+02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s c3h6+h02=c3h5-a c3h6+h02=c3h5-a c3h6+h02=c3h5-a	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2 +h202 +h202 +h202 h20	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.50E+03	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7	80000.0 -3060.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8
938. 939. 940. 941. 942. 943. 944. 945. 946.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+ho2=c3h6 c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+b02=c3h5-s+ c3h6+ho2=c3h5-t c3h6+ho2=c3h5-a+ c3h6+ho2=c3h5-a+ c3h6+ho=c3h5-a+ c3h6+b=c3h5-a+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2 +202 +202 h20 h20 h20	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8	80000.0 -3060.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0
938. 939. 940. 941. 942. 943. 944. 945. 946.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c3h5-a+h02=c3h6 c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h0=c3h5-s+ peclared duplic	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 +1202 +1202 +1202 h20 h20 ate reaction	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8	80000.0 -3060.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0
938. 939. 940. 941. 942. 943. 944. 945. 946. 947.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+ho2=c3h5-s c3h6+ho2=c3h5-a c3h6+ho=c3h5-s+ Declared duplic c3h6+ho=c3h5-s+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 +h202 +h202 +h202 h20 h20 h20	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03 1.01E+00	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8 3.5	80000.0 -3060.0 60200.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0 -101.0
938. 939. 940. 941. 943. 944. 945. 944. 945. 946.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+h02=c3h5 c3h6+b02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-a+ c3h6+h0=c3h5-a+ c3h6+oh=c3h5-a+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-s+ Declared duplic	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2 +120	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03 1.01E+00	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8 3.5 2.5	80000.0 -3060.0 60200.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0 -101.0
938. 939. 940. 941. 942. 943. 944. 944. 944. 947. 948.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6+o2=c3h5-t+ c3h6+o2=c3h5-t+ c3h6+ho2=c3h5-t+ c3h6+ho2=c3h5-t+ c3h6+ho2=c3h5-a+ c3h6+ho=c3h5-a+ c3h6+oh=c3h5-a+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-s+ Declared duplic	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2 ho2 ho2 h20 2 h20 h20 cate reaction h20	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03 1.01E+00 4.67E+04	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8 3.5 2.5	80000.0 -3060.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0 -101.0 1748.0
938. 939. 940. 942. 943. 944. 944. 944. 944. 944. 944. 944	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c3h5-a+h02=c3h6 c3h6+c3=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h0=c3h5-s+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-s+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 +h202 +h202 +h202 h20 h20 h20 h20 h20 h20 h20 h20 h20	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03 1.01E+00 4.67E+04 5.72E 07	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8 3.5 2.5 2.5	80000.0 -3060.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0 -101.0 1748.0
938. 939. 940. 941. 942. 943. 944. 945. 946. 947. 948. 949.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+o2=c3h5-s+ c3h6+b02=c3h5-s c3h6+b02=c3h5-s c3h6+b02=c3h5-s c3h6+bn=c3h5-s+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-s+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 +h202 +h202 +h202 +h202 ate reaction h20 cate reaction h20	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03 1.01E+00 4.67E+04 5.72E-07	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8 3.5 2.5 2.6	80000.0 -3060.0 60200.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0 -101.0 1748.0 -3086.0
938. 939. 940. 941. 943. 944. 945. 944. 945. 946. 947. 948. 949.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar c3h6=c3h4-p+h2 c3h5-a+h02=c3h5 c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-s+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-s+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 h02 +h202 +h202 +h202 +h202 +h202 h20 ate reaction h20 ate reaction	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03 1.01E+00 4.67E+04 5.72E-07 6.23E+00	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8 3.5 2.5 2.6 0.8	80000.0 -3060.0 60200.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0 -101.0 1748.0 -3086.0
938. 939. 940. 941. 942. 944. 944. 945. 944. 947. 947. 948. 949.	Low pressure li TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6=c3h4-p+h2 c3h6=c3h5-s+ c3h6+h02=c3h5-t+ c3h6+h02=c3h5-t+ c3h6+h02=c3h5-t c3h6+h02=c3h5-t c3h6+h0=c3h5-a+ c3h6+oh=c3h5-a+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+ Declared duplic c3h6+oh=c3h5-t+	mit: 0.42700E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by +02 ho2 ho2 ho2 ho2 ho2 ho2 ho2 ho2 ho2 ho	59 -0.11940E+02 00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.93E+13 5.40E+02 1.40E+13 7.00E+12 7.50E+09 3.00E+09 7.71E-02 5.27E+04 7.59E+03 1.01E+00 4.67E+04 5.72E-07 6.23E+09 2.24E+09	0.10 0.0 2.8 0.0 0.0 0.0 4.4 2.7 2.8 3.5 2.5 2.6 0.8 1.2	80000.0 -3060.0 60200.0 60200.0 12570.0 9930.0 13547.0 312.8 2193.0 -101.0 1748.0 -3086.0 -147.0

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.	$c_{3h5-s+ch3=c_{3h4-p+ch4}}$	1.00E+11	0.0	0.0
955	c3h6+o=c3h5-s+oh	1.20E+11	0.7	8960.0	1013.	$c_{3h5-s+c_{2h5=c_{3h4-p+c_{2h6}}}$	1.00E+11	0.0	0.0
956	$c_{3h6+o=c_{3h5-t+oh}}$	6 02E+10	0 7	7633 0	1014	$c_{3h5-s+c_{2h}3=c_{3h}4-p+c_{2h}4}$	1 00E+11	0 0	0.0
957	$c_{3h6+b=c_{3h5-a+b}^2}$	3 41E+04	27	3793 1	1015	$c_{3h5} = t + c_{2m}^2 = c_{b3}^2 c_{c}^2 c_{b2}^2 + c_{c}^2$	1 495+17	-1.6	8096 0
958	$c_{3}b_{b+b=c_{3}b_{5-s+b_{2}}}$	1 86F+04	3.0	11278 0	1015.	$a^{3}b^{5}-t+a^{2}-a^{3}b^{4}-a+ba^{2}$	1 305+07	1 2	7305 0
950.	$c_{3h6+h=c_{3h5-t+h2}}$	3 745+03	3 1	8185 2	1017	$a^{3}b^{5}-t+a^{2}-ab^{3}a^{2}a^{2}a^{3}b^{2}a^{3}b^{3}b^{3}a^{3$	1 360+25	_3 9	7614 0
960	$a^{2}b^{4}a^{3}b^{5}a^{2}b^{5}a^{2}b^{4}a^{2$	4 54E+01	3.3	7152 0	1017.		1.30E+23	-3.0	/014.0
900.	$c_{3}b_{4}c_{13}=c_{3}b_{5}-c_{4}c_{14}$	7 10E+02	2.2	13013 0	1018.	$c_{3n5}-c_{n02}=>c_{n2}c_{0}+c_{n3}+c_{n3}$	2.00E+13	0.0	0.0
901.	$c_{3}b_{4}c_{13}-c_{3}b_{5}-t_{4}c_{14}$	9 15E+02	1 0	13700 0	1019.	C3N5-L+O=>CN2C0+CN3	1.81E+14	0.0	0.0
902.		0.IJE+UJ	1.9	13/90.0	1020.	C3n5-t+nco=>c0+C3n6	9.00E+13	0.0	0.0
963.	C3n6+C3n6=C3n5-a+nC3n7	2.53E+14	0.0	55173.0	1021.	c3n5-t+on=>cn2co+cn3+n	5.00E+12	0.0	0.0
964.	C3nb+C3nb=C3n5-a+1C3n/	4.88E+13	0.0	52304.0	1022.	c3h5-t+h=c3h4-p+h2	1.00E+13	0.0	0.0
965.	C3nb+C2n5=C3n5-a+C2nb	2.23E+00	3.5	6640.0	1023.	c3h5-t+ch3=c3h4-a+ch4	1.00E+11	0.0	0.0
966.	C3nb+C2n3=C4nb+Cn3	/.20E+11	0.0	5008.0	1024.	c3h5-t+ch3=c3h4-p+ch4	1.00E+11	0.0	0.0
967.	C3n6+nc0=C3n5-a+cn20	1.08E+07	1.9	1/010.0	1025.	c3h5-t+c2h5=c3h4-a+c2h6	1.00E+11	0.0	0.0
968.	C3n5-s+cn2o=C3n6+nC0	5.42E+U3	2.8	5862.0	1026.	c3h5-t+c2h3=c3h4-a+c2h4	1.00E+11	0.0	0.0
969.	$c_{3h6+c_{2h3}=c_{3h5}-a+c_{2h4}}$	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+C	4	
9/1.	c3h6+c2h3=c3h5-s+c2h4	2.21E+00	3.5	4682.0		TROE centering: 0.23400E+00 0.33000E+03	0.48080E+C	0.72	2620E+04
972.	c3h6loh2oo=ch3cho+ch2o+oh	1.00E+12	0.0	30.0	1028.	c3h4-a+o2=c3h3+ho2	4.00E+13	0.0	61500.0
9/3.	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-aoo	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-aooh	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-aooh=c2h3cho+h2o	2.54E+28	-5.0	49919.4	1036.	c3h4-a+oh=c3h3+h2o	5.05E+05	2.4	2879.0
983.	c3h5-aooh=c3h5o+oh	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=ch3+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.	$c_{3h4-a+c_{3h4-a=c_{2h4+c_{4h4}}}$	1.09E+15	0.0	48090.0
999.	c3h5-a+hco=c3h6+co	6.03E+13	0.0	0.0	1050	$c_{3h4o2h=>c_{3h4-p+ho2}}$	3 16E+11	0.0	19500 0
1000.	c3h5-a+ch3o=c3h6+ch2o	3.01E+13	0.0	0.0	1051	$c_{3h4o2h=>c_{3h4-a+ho2}}$	3 16E+11	0.0	19500.0
1001.	c3h5-a+c2h3=c3h6+c2h2	4.82E+12	0.0	0.0	1052	$c_{3h4o2h=c_{2h3cho+oh}}$	3 10E+37	-10 1	28588 0
1002.	c3h5-a+c2h3=c3h4-a+c2h4	2.41E+12	0.0	0.0	1053	$c_{3h4o2h=c_{3h4o+oh}}$	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-aoo+ho2=c3h5-aooh+o2	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	1050.	c3h4o+b=>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
					±000.			· · ·	T 1000.0

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 0.67	770E+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	$c_{3h4-p+o=ch2co+ch2}$	6.40E+12	0.0	2100.0	
1071	$c_{3h4-p+o=c_{2h3+hco}}$	3 20E+12	0.0	2100.0	
1072	$c_{3h4-p+o=hcco+ch3}$	9.18E+12	0.0	2100.0	
1073	$c_{3h4-p+o=ch^2o+c^2h^2}$	3 20F+11	0.0	2100.0	
1074	c3h4-p+o=hcco+ch2+h	3 20E+12	0.0	2010 0	
1075	$c_{3h4-p+b=c_{3h3+h2}}$	3 57E+04	2.8	4821 0	
1076	$a_{3}b_{1}-b_{2}b_{3}=a_{3}b_{3}+c_{5}b_{4}$	2 000112	2.0	7700 0	
1077	$c_{2}h_{-}b_{-}c_{1}b_{-}c_{2}h_{2}+c_{2}h_{1}$	1 00E+12	0.0	7700.0	
10770	$c_{2h4-p+c_{2h3-c_{2h3}+c_{2h4}}}$	1 00E+12	0.0	7700.0	
1070.	$c_{2}h_{-}p_{+}c_{2}h_{-}c_{3}h_{+}c_{2}h_{-}c_{2}h_{-}c_{3}h_{-}c_{2}h_{-}c_{3}h_{-$	2 44E+04	0.0	1920 0	
1000	c3n4-p+0=c3n3+0n	3.44E+04	2.2	4830.0	
1000.	$c_{2112}+c_{112}=c_{3114}-p$	4.20E+12	0.0	14510 0	
1081.	C3n4-p+on=cn3concn	5.69E+39	-8.2	14510.0	
1000	Declared duplicate reaction	C 007104	4 2	2724 0	
1082.	c3n4-p+on=cn3concn	6.09E+24	-4.3	3/34.0	
1000	Declared duplicate reaction	0 7 (7) 40	0 5	15030 0	
1083.	c3n4-p+on=cn3ccnon	9./6E+43	-9.5	15070.0	
	Declared duplicate reaction	4 00-00			
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	1.1/E+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	140
	Declared duplicate reaction				140

1097	ch2chchoh=c2h4+hco		8 75F+41	-8.6	60680 0
1097.	Declared duplicate reaction		0./35141	-0.0	00000.0
1000	ablabababaalb41baa	1	5 04E+15	1 5	12610 0
1090.	Declared duplicate reaction		J.24671J	-1.5	43010.0
1000	bectared duplicate reaction	1	0 405125	C 0	(0220 0
1099.	Ch2chchon=ch3chco+h		8.40E+35	-0.8	60330.0
	Declared duplicate reaction	1			
1100.	ch2chchoh=ch3chco+h		1.49E+25	-4.5	49740.0
	Declared duplicate reaction	1			
1101.	ch2chchoh=c2h3cho+h		4.68E+32	-5.7	54740.0
	Declared duplicate reaction	1			
1102.	ch2chchoh=c2h3cho+h		3.85E+21	-3.4	43120.0
	Declared duplicate reaction	1			
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	$c_{3h_{2+h=c_{3h_{2+h_{2}}}}$		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	$c_{3h_3+ch_2=c_4h_4+h_3+h_4}$		4 00E+13	0.0	0.0
1117	bcco+c2b2=c3b3+co		1 00E+11	0.0	3000 0
1110	a3h3+hao=a3h4-a+ao		2 500111	0.0	0.0
1110.	$a^{2}h^{2}+bco=a^{2}h^{4}-b^{2}co$		2.505+13	0.0	0.0
1120	$c_{3113}+11c_{0}-c_{3114}-p_{+}c_{0}$		2.JUETIJ 2.EOEI12	0.0	0.0
1120.	C3N3+NCCO=C4N4+CO		2.50E+13	1 1	40720 0
1121.	CSIIS+CIIS=CZIIS+CZII		4.36E+17	-1.1	48/30.0
1100	Reverse Arrhenius coefficie	ents:	1.016+13	0.0	0.0
1122.	c3h3+c3h4-p=c6h6+h		7.00E+11	0.0	12000.0
1123.	c3h3+c3h4-a=c6h6+h		7.00E+11	0.0	12000.0
1124.	ch3+c2h=c3h3+h		2.41E+13	0.0	0.0
1125.	c2h2+ch=c3h3		3.00E+13	0.0	0.0
1126.	ch+c2h2=c3h2+h		1.00E+14	0.0	0.0
1127.	c3h2+o2=hcco+h+co		2.00E+12	0.0	1000.0
1128.	c3h2+o=c2h2+co		6.80E+13	0.0	0.0
1129.	c3h2+oh=c2h2+hco		5.00E+13	0.0	0.0
1130.	c3h2+ch=c4h2+h		5.00E+13	0.0	0.0
1131.	c3h2+ch2=nc4h3+h		5.00E+13	0.0	0.0
1132.	c3h2+ch3=c4h4+h		5.00E+12	0.0	0.0
1133.	c3h2+hcco=nc4h3+co		1.00E+13	0.0	0.0
1134.	c3h2+h(+M)=c3h3(+M)		1.02E+13	0.3	279.6
	Low pressure limit: 0.2800	0E+31 -0.38600E+01	0.33198E+04		
	TROE centering: 0.7820	00E+00 0.20750E+03	0.26630E+04	0.609	50E+04
	h2 Enhanced by	y 2.500E+00			
	h2o Enhanced b	y 1.200E+01			
	ar Enhanced b	y 7.500E-01			
	h2o2 Enhanced by	v 1.200E+01			
1135.	c2h5cho=c2h5co+h	1	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
	11111110.02 01001010.102			2.0	

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	3 675+03	3 1	5343 0
1140.	Declared duplicate reaction	5.071105	5.1	5545.0
1147	-2hEshelb-ma2h4shelb2	1 (2011)	0.0	10074 5
114/.	cznscho+n=pczn4cho+nz	1.63E+14	0.0	136/4.5
1140	Declared duplicate reaction	E 055.10	0 0	1000 0
1148.	c2h5cho+o=c2h5co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
1149.	c2h5cho+o=ch3chcho+oh	4.7/E+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	$c^{2}h^{5}cho^{+}hco=c^{2}h^{5}co^{+}ch^{2}o$	1 70E+12	0.0	8440.0
1161	$c^{2}h^{5}cho+ch^{3}o=c^{2}h^{5}co+ch^{3}oh$	1 15E+11	0.0	1280 0
1162	$c^{2h5cho+ch3o^2-c^{2h5co+ch3o^{2h}}}$	3 01 1	0.0	11020 0
1162	$c_{2h} = c_{2h} = c$	2 01112	0.0	11020.0
1103.	-2h5-h-L-2h22h52h4	3.01E+12	0.0	11920.0
1104.	C2II5CII0+C2II5=C2II5C0+C2II4	1.70E+12	0.0	8440.0
1165.	c2h5cho+c2h5=c2h5co+c2h6	1./0E+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
11/5.	Declared duplicate reaction	7:032123	5.0	27220.0
1174	pectated dupitcate reaction	7 005135	7 4	51140 0
11/4.		7.90E+33	-/.4	JII40.0
1100	Declared duplicate reaction	4 007 10	2 0	41000 0
11/5.	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	2.00F+13	0.0	20000.0
		2.002.10	2.0	

1104		0 425100	0
1184.	opc2n4cno+oz=cnocn2cno+no2	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
1107.	Bouerse Arrhenius seefficients.	1 465114	0
1100	Reverse Armenius Coefficients:	1.406714	-0
1188.	cn3cncno+o2=>cn3cno+co+on	3.628+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
1100.	Dealared duplicate reaction	1.000.01	-
1104	bectared dupitcate reaction	E 045.00	2
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	$ch_{shcho} = c_{h_{shc}}^2 + c_{h_{shc}}^2$	9 518+00	-7
1197.	Decland duplicate resetion	9.010100	- /
1100	Declared dupilcale reaction	1 055.45	0
1198.	ch3chcho=c2h4+hco	1.25E+4/	-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	3 688+29	- 5
1201.	Dealared duplicate reaction	5.000129	-0
1000	beclared duplicate reaction	4 1 4 5 4 7	0
1202.	ch3chcho=c2h3cho+h	4.14E+4/	-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	$c^{2}b^{5}c^{2}+m=c^{2}b^{5}+c^{2}+m$	4 408+15	0
1200.	$c^{2h5co3} = > ch^{3}chco+ho^{2}$	5 75E+08	1
1207.		1 400-00	1
1208.	c2n5co3=>c2n4+co+no2	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	$c^{2}h^{3}cho+oh=c^{2}h^{3}co+h^{2}o$	2 35E+10	0
1215	$a^{2}h^{3}cho^{+}ba^{2}=a^{2}h^{3}co^{+}h^{2}o^{2}$	3 105+10	0
1010	2113CH0+H02=C2H3C0+H202	1 705,10	0
1216.	c2n3cno+cn3=c2n3co+cn4	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	
1220.	pro2ch+c2=hc2+pro2ch=2	1 005+13	0
1005	$p_1 o_2 o_1 + o_2 = i a_2 p_1 o_2 + o_1 a_2$	1 000100	0
1000	$p_1 o_2 o_1 + c_1 o_2 = 1 c_2 n / o + c_1 4$	1.025+00	3
1226.	prozon+cn3=prozon-1+cn4	⊥.U8E+U3	3

1227.	pro2oh+ch3=pro2oh-2+ch4	6.60E+02	2.9	5730.0	
1228.	pro2oh+h=ic3h7o+h2	9.46E+02	3.1	8701.0	
1229.	pro2oh+h=pro2oh-1+h2	1.06E+05	2.8	7495.0	
1230.	pro2oh+h=pro2oh-2+h2	4.40E+04	2.7	2915.0	
1231.	pro2oh+o=ic3h7o+oh	1.46E-03	4.7	1727.0	
1232.	pro2oh+o=pro2oh-1+oh	1.96E+06	2.4	4750.0	
1233	pro2oh+o=pro2oh=2+oh	7 25E+04	2 5	876 0	
1234	pro2oh+oh=ia3h7o+h2o	7 905+06	1 6	-461 0	
1204.	Declared duplicate presting	7.901100	1.0	-401.0	
1005	Declared duplicate reaction	1 (07.02	0.0	F2 0	
1235.	pro2oh+oh=1c3h/o+h2o	1.606+03	2.9	53.0	
1000	Declared duplicate reaction	4 1	~ ~	5050 0	
1236.	prozon+on=prozon-1+nzo	4./48+10	0.9	5350.0	
	Declared duplicate reaction				
1237.	pro2oh+oh=pro2oh-1+h2o	1.92E+06	1.9	-830.7	
	Declared duplicate reaction				
1238.	pro2oh+oh=pro2oh-2+h2o	7.18E+05	2.2	-1537.7	
1239.	pro2oh+ho2=ic3h7o+h2o2	6.47E-07	5.3	10533.0	
1240.	pro2oh+ho2=pro2oh-1+h2o2	3.19E-05	5.1	14871.0	
1241.	pro2oh+ho2=pro2oh-2+h2o2	8.60E+00	3.5	9732.0	
1242.	pro2oh+ch3o=pro2oh-1+ch3oh	3.24E+11	0.0	7300.0	
1243.	pro2oh+ch3o=pro2oh-2+ch3oh	2.30E+10	0.0	2900.0	
1244.	ic3h7o+o2=ch3coch3+ho2	4.28E+10	0.0	1100.0	
1245.	pro2oh-1+o2=pro2oh1d+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0	
1246	pro2oh-2+o2=ch3coch3+ho2	1 54E+18	-1.8	1120.0	
1247	pro2oh=2+o2=pro2oh1d+ho2	1 78E+04	2 1	470 0	
1248	pro2oh=1=ch3+c2h3oh	2 83E+36	-7 1	40100 0	
12/0	pro2oh-1-pro2oh1d+h	6 30E+45	-10 4	46160.0	
1250	pro2oh_1=prozoniu.n	2 01E+27	-10.4	40100.0	
1051		3.01E+37	-7.2	42200.0	
1251.	prozon-z=prozonia+n	1.005+41	-8.5	49400.0	
1252.		1.09E+34	-6.9	19200.0	
1253.	1C3n/O=Cn3COCn3+n	4.64E+28	-5.8	19200.0	
1254.	proloh=c3h6+h2o	3.53E+13	0.0	67260.0	
1255.	proloh(+M)=pc2h4oh+ch3(+M)	8.81E+23	-2.1	89820.0	
	Low pressure limit: 0.22000E+65 -0.13390E+02	0.95330E+0	5		
	TROE centering: 0.30700E+00 0.11000E+04	0.93300E+1	LO 0.93	300E+10	
1256.	proloh(+M)=c2h5+ch2oh(+M)	1.73E+26	-2.7	86207.0	
	Low pressure limit: 0.16770E+90 -0.20364E+02	0.99453E+0	5		
	TROE centering: 0.55845E-02 0.35820E+03	0.49325E+0	0.24	761E+04	
1257.	proloh(+M)=nc3h7+oh(+M)	5.26E+20	-1.3	94630.0	
	Low pressure limit: 0.89200E+58 -0.11780E+02	0.99410E+0	5		
	TROE centering: 0.35500E+00 0.94200E+03	0.99200E+1	LO 0.99	200E+10	
1258.	proloh=proloh-3+h	1.84E+17	-0.4	101200.0	
1259.	proloh=proloh-2+h	3.52E+18	-0.7	100400.0	
1260.	proloh=proloh-1+h	1.78E+16	-0.2	95310.0	
1261.	proloh=nc3h7o+h	7.03E+14	0.1	104900.0	
1262.	pro1oh+o2=pro1oh-3+ho2	3.00E+13	0.0	52290.0	
1263	proloh+o2=proloh-2+ho2	2 44E+12	0.2	49760 0	
1264	proloh+o2=proloh-1+bo2	2 00E+13	0.0	49460 0	
1265	pro1oh+o2=pro1oh+1+ho2 pro1oh+o2=pro3h7o+ho2	1 00E+13	0.0	55000 0	
1266	proloh+b=pg3h7o+b2	0 /6E±02	3 1	9701 0	
1267	prolohth=proloh=1+b2	9.40ET02	27	2015 0	
1260	proton n=proton=1 nz	1 092105	2.7	2913.0	
1200.	proton+n=proton-z+nz	1.086+05	2.1	4440.0	
1269.	proion+n=proion-3+n2	3.6/E+U3	3.1	5343.0	
1050	Declared duplicate reaction	1 (05 11	0 0	1000 -	
1270.	proloh+h=proloh-3+h2	1.63E+14	0.0	13674.5	
	Declared duplicate reaction				
1271.	proloh+oh=nc3h7o+h2o	7.90E+06	1.6	-461.0	
	Declared duplicate reaction				

Declared duplicate reaction 1273. proioh+oh=proioh-1+h20 3.91E+03 2.8 -3666.0 1274. proioh+oh=proioh-2+h20 3.91E+03 2.8 -2061.2 1275. proioh+oh=proioh-3+h20 1.37E+07 1.8 668.3 1276. proioh+operoioh-3+h0 9.81E+05 2.6 3029.0 1278. proioh+operoioh-1+ch 1.48E+05 2.5 876.0 1279. proioh+h2=proioh-1+ch 1.48E+05 2.5 8268.0 1281. proioh+h2=proioh-2+h2o2 2.66E-05 5.3 8268.0 1282. proioh+h2=proioh-2+h2o2 2.66E-01 4.3 17765.0 1283. proioh+hc3=proioh-2+h2o2 2.66E-01 4.3 17605.0 1284. proioh+hc3=proioh-2+h2o2 2.66E-01 4.8 17060.0 1285. proioh+hc3=proioh-2+h2o2 2.68E-01 4.8 8200.0 1286. proioh+hc3=proioh-2+h2o4 3.00E-01 4.0 8200.0 1287. proioh+c3=proioh2d+h2o4 9.08E+42 -9.1 48600.0 1290. proioh-3=proioh2d+h2 5.6E+40 -8.2 43700.0 1291. proioh-2=proioh2d+h2 <t< th=""><th>1272.</th><th>proloh+oh=nc3h7o+h2o</th><th>1.60E+03</th><th>2.9</th><th>53.0</th></t<>	1272.	proloh+oh=nc3h7o+h2o	1.60E+03	2.9	53.0
1273. proloh+oh-proloh-2+h20 4,562+03 2.8 -3666.0 1274. proloh+oh-proloh-2+h20 1,37E+07 1.8 668.3 1275. proloh+oh-proloh-3+h0 1,37E+07 1.8 668.3 1278. proloh+o-proloh-3+h0 1,48E+05 2.6 3029.0 1278. proloh+o-mc3h70+h0 1,46E+05 2.6 3029.0 1280. proloh+o-mc3h70+h0 1,46E+05 2.6 3029.0 1281. proloh+o-mc3h70+h2 2.60E+05 3.8268.0 1033.2 1282. proloh+h02=proloh-1+h202 2.66E+01 4.3 17265.0 1283. proloh+h03=proloh-2+h202 1.50E+02 3.1 7600.0 1284. proloh+h3=nc3h70+ch4 1.02E+00 3.6 8221.0 1285. proloh+h3=proloh-2+ch4 3.00E+01 4.0 8200.0 1286. proloh+h3=proloh-2+ch4 3.00E+01 4.0 8200.0 1289. proloh-3=ch4+h20 6.67E+24 -8.1 4.700.0 1280. proloh-3=ch4+h20 6.67E+41 -8.6 46800.0 1281. proloh-3=ch4+h20 6.47E+41 -8.6 46300.0 1282. proloh-3=ch4+h20 1.56E+12 0.0 5000.0		Declared duplicate reaction			
1274, proloh+oh-proloh-3+h20 3,91E+03 2,8 -2061,2 1275, proloh+omproloh-3+h0 9,81E+05 2,4 4750,0 1277, proloh+omproloh-3+h0 1,48E+05 2,5 8760,0 1278, proloh+omproloh-2+oh 1,48E+05 2,5 8760,0 1280, proloh+omproloh-2+oh 1,46E+05 2,5 8760,0 1280, proloh+omproloh-2+b20 6,47E+07 5,3 10533,0 1281, proloh+ho2=proloh-2+b202 2,86E+01 4,3 1076,0 1282, proloh+ho2=proloh-2+b202 2,86E+01 4,3 1726,0 1284, proloh+ho3=proloh-2+ch4 2,02E+02 3,1 8790,0 1285, proloh+ch3=proloh-2+ch4 3,00E+01 4,0 8220,0 1286, proloh+c3=proloh-2+ch4 3,00E+01 4,0 8200,0 1281, proloh-3=ch4+ch20 1,68E+42 -9,1 48600,0 1290, proloh-3=ch4+ch20 1,58E+12 0,0 5000,0 1281, proloh-3=ch4+ch20 1,58E+12 0,0 5000,0 1281, proloh-3=ch4+ch20 1,58E+12 0,0 5000,0 1281, proloh-3=ch4+ch20 1,58E+12 0,0 5000,0	1273.	proloh+oh=proloh-1+h2o	4.56E+03	2.8	-3686.0
1275. pro1oh+ompro1oh-3+bo 1.37E+07 1.8 668.3 1276. pro1oh+ompro1oh-3+bo 9.81E+05 2.4 4750.0 1278. pro1oh+ompro1oh-2+bo 1.44E+05 2.6 3029.0 1279. pro1oh+ompro1oh-1+bh 1.44E+05 2.6 3029.0 1280. pro1oh+ompro1oh-1+bh202 6.47E+07 5.3 8268.0 1281. pro1oh+ompro1oh-1+bh202 2.66E+03 4.7 1730.0 1282. pro1oh+ho2=pro1oh-2+bh202 1.50E+02 4.5 14706.0 1283. pro1oh+hc3=pro1oh-3+bh202 2.64E+01 4.3 17265.0 1284. pro1oh+ch3=nc3h70+ch4 1.02E+00 3.6 8221.0 1285. pro1oh+ch3=pro1oh-3+ch4 9.02E+02 2.9 8790.0 1280. pro1oh-3=c2h+ch20 1.63E+42 -8.9 47700.0 1290. pro1oh-3=c2h+ch20 1.63E+42 -8.9 47700.0 1291. pro1oh-3=c2h+ch20 1.58E+12 0.0 5000.0 1292. pro1oh-3=c2h+ch20 1.58E+12 0.0 5000.0 1293. pro1oh-3=c2h+ch20 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. pro1oh-3=c2h+ch20 1.58E+12 0.0 5000.0	1274.	proloh+oh=proloh-2+h2o	3.91E+03	2.8	-2061.2
1276. proloh-sproloh-2+oh 9.81E+05 2.4 4750. 1277. proloh-sproloh-2+oh 1.44E+05 2.6 3029.0 1278. proloh-sproloh-2+oh 1.45E+05 2.5 876.0 1280. proloh+sproloh-2+proloh 1.46E+03 4.7 1730.0 1281. proloh+ho2=proloh-2+h2o2 2.60E+05 5.3 8266.0 1282. proloh+ho2=proloh-2+h2o2 2.64E+01 4.3 1706.0 1284. proloh+ch3=proloh-2+ch4 1.02E+00 3.6 8221.0 1285. proloh+ch3=proloh-2+ch4 9.20E+02 2.9 8790.0 1286. proloh-3=proloh-2+ch4 9.02E+02 2.9 8790.0 1287. proloh-3=proloh-2+ch4 9.02E+02 2.9 8790.0 1289. proloh-3=proloh2+th 6.478+01 8.30E+40 -8.8 46800.0 1290. proloh-3=proloh2+th 6.4630.0 1.58E+12 0.0 5000.0 1291. proloh-2-sproloh2+th 4.6700.0 1.58E+12 0.0 5000.0	1275.	proloh+oh=proloh-3+h2o	1.37E+07	1.8	868.3
1277. proloh-sproloh-1+oh 1.445+05 2.6 3029.0 1278. proloh+omc3h7o+oh 1.455+05 2.5 876.0 1280. proloh+ho2=mc3h7o+oh 1.455+05 2.5 876.0 1281. proloh+ho2=mc3h7o+oh22 6.475=07 5.3 10533.0 1282. proloh+ho2=proloh-1+h2o2 2.604=01 4.3 17265.0 1282. proloh+ch3=proloh-1+ch4 2.02F+02 3.1 7760.0 1285. proloh+ch3=proloh-1+ch4 9.02E+02 2.9 8790.0 1286. proloh-ch3=proloh-3+ch4 9.02E+02 2.9 8790.0 1287. proloh-3=proloh-3+ch4 9.02E+02 2.9 8790.0 1288. proloh-3=proloh-3+ch4 9.02E+02 2.9 8790.0 1290. proloh-3=proloh-2+ch20 1.63E+42 -8.9 47700.0 1291. proloh-3=proloh2+ch20 1.53E+12 0.0 5000.0 1292. proloh-2=proloh2+ch2 1.56E+12 -7.1 43300.0 1294. proloh-2=proloh2+	1276.	proloh+o=proloh-3+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
1278. proloh+om_ch7o-ch 1.45E+05 2.5 876.0 1280. proloh+bo2=nc3h7o+ch 1.46E-03 4.7 1730.0 1281. proloh+bo2=proloh-1+h2o2 2.80E-05 5.3 8268.0 1282. proloh+bo2=proloh-2+h2o2 2.64E-01 4.3 1705.0 1283. proloh+ch3=proloh-2+h2o2 2.64E-01 4.3 17265.0 1284. proloh-ch3=proloh-2+ch4 2.02E+02 3.1 7600.0 1285. proloh-ch3=proloh-2+ch4 2.02E+02 2.9 8790.0 1286. proloh-3=ch4+ch2o 1.63E+42 -9.1 48600.0 1289. proloh-3=ch4+ch2oh 9.08E+42 -9.1 48600.0 1291. proloh-3=ch4+ch2oh 8.30E+40 -8.8 46600.0 1292. proloh-3=ch4+ch2oh 4.30E+10 -8.2 43700.0 1293. proloh-2=proloh24+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh24+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh-2=proloh24+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. pro	1277.	proloh+o=proloh-2+oh	1.44E+05	2.6	3029.0
1279. proloh+ac_mc3h7o+b2 1.46E-03 4.7 1730.0 1280. proloh+b2=proloh-1+h2o2 2.80E-05 5.3 8268.0 1281. proloh+b2=proloh-1+h2o2 2.64E-01 4.3 17265.0 1283. proloh+c3=proloh-1+h2o2 2.64E-01 4.3 17265.0 1284. proloh+c3=proloh-1+ch4 1.02E+00 3.6 8221.0 1285. proloh+c3=proloh-1+ch4 9.20E+02 2.9 8790.0 1286. proloh-ch3=proloh-2+ch4 9.00E+42 -9.1 48600.0 1289. proloh-3=proloh-3+ch4 9.00E+42 -9.1 48600.0 1290. proloh-3=proloh-2+ch4 8.02E+40 -8.2 43700.0 1291. proloh-3=proloh2+ch2 1.58E+12 0.0 5000.0 1292. proloh-2=proloh2+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1293. proloh-2=proloh2+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh2+h02 1.58E+12 0.5000.0 1.63E+42 -8.9 47700.0	1278.	proloh+o=proloh-1+oh	1.45E+05	2.5	876.0
1280. proloh+ho2=nc3h7o+h2c2 6.47E=07 5.3 10533.0 1281. proloh+ho2=proloh=2+h2c2 1.50E=02 4.5 14706.0 1282. proloh+ho2=proloh=2+h2c2 1.50E=02 4.5 14706.0 1284. proloh+ho3=proloh=2+h2c2 2.64E=01 4.3 17265.0 1285. proloh+ch3=proloh=2+ch4 2.20E+02 2.9 8790.0 1287. proloh-ch3=proloh=2+ch4 3.00E=01 4.0 8200.0 1288. proloh=3=ch4+ch2oh 9.08E+42 -9.1 48600.0 1291. proloh=3=ch4+ch2oh 8.30E+40 -8.2 4700.0 1292. proloh=3=ch4+ch2oh 8.30E+40 -8.2 4300.0 1292. proloh=3=cpiloh=2 5.96E+40 -8.2 4300.0 1294. proloh=2=proloh1d+h 4.52E+35 -7.1 43300.0 1295. proloh=2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-1=proloh1d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1294. proloh-1=cpilo	1279.	proloh+o=nc3h7o+oh	1.46E-03	4.7	1730.0
1281. proloh+ho2=proloh-1+h2o2 2.80E-05 5.3 8268.0 1282. proloh+ho2=proloh-3+h2o2 1.50E-02 4.5 14706.0 1284. proloh+ho3=proloh-3+h2o2 2.64E-01 4.3 17265.0 1285. proloh+h3=proloh-1+ch4 2.02E+02 3.1 7600.0 1286. proloh+ch3=proloh-1+ch4 9.20E+02 3.1 7700.0 1287. proloh-ch3=proloh-2+ch4 9.08E+42 -8.9 47700.0 1289. proloh-3=ch3+ch20 1.63E+42 -8.9 47700.0 1289. proloh-3=proloh2d+h 6.30E+40 -8.2 4700.0 1291. proloh-3=proloh2d+h 6.30E+40 -8.2 4700.0 1292. proloh-3=proloh2d+h 4.35E+12 0.0 5000.0 1293. proloh-2=proloh2d+h 4.40E+35 -7.0 4300.0 1294. proloh-2=proloh2d+h 4.52E+35 -7.1 4300.0 1295. proloh-2+2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1297. proloh-2+2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 4770.0 <t< td=""><td>1280.</td><td>proloh+ho2=nc3h7o+h2o2</td><td>6.47E-07</td><td>5.3</td><td>10533.0</td></t<>	1280.	proloh+ho2=nc3h7o+h2o2	6.47E-07	5.3	10533.0
1282. proloh+ho2=proloh-2+h2o2 1.50E-02 4.5 14706.0 1283. proloh+ho3=proloh-3+h2o2 2.64E-01 4.3 17265.0 1285. proloh+ch3=proloh-1+ch4 2.20E+02 3.1 7600.0 1285. proloh+ch3=proloh-2+ch4 9.20E+02 2.9 8790.0 1287. proloh-da=proloh-3+ch4 3.00E-01 4.0 8200.0 1288. proloh-3=ch4+ch2oh 9.08E+42 -9.1 48600.0 1290. proloh-3=ch4+ch2oh 9.08E+42 -9.1 48600.0 1291. proloh-3=proloh24+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1292. proloh-3=proloh24+h 8.3 0.50E+40 -8.2 43700.0 1293. proloh-2=proloh1d+h 4.40E+35 -7.0 43100.0 Declared duplicate reaction 1255. proloh-2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+12 -8.0 <	1281.	proloh+ho2=proloh-1+h2o2	2.80E-05	5.3	8268.0
1283. proloh+ch3=proloh=3+b2o2 2.64E=01 3.6 8221.0 1285. proloh+ch3=proloh=1+ch4 1.02E+00 3.6 8221.0 1286. proloh+ch3=proloh=2+ch4 9.20E+02 3.1 7600.0 1286. proloh+ch3=proloh=2+ch4 9.20E+02 2.9 8790.0 1289. proloh=3=cb5+ch2o 1.63E+42 -9.1 48600.0 1290. proloh=3=cb1+ch2o 1.63E+42 -9.1 48600.0 1291. proloh=3=cp1oh2d+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1292. proloh=2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1293. proloh=2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh=2=proloh2d+h 4.52E+35 -7.1 4300.0 Declared duplicate reaction 1.63E+42 -8.9 4700.0 1295. proloh=2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1294. proloh=2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1295. proloh=2=broloh2d+ho2	1282.	proloh+ho2=proloh-2+h2o2	1.50E-02	4.5	14706.0
1284. proloh+ch3=rc3h7o+ch4 1.02E+00 3.6 8221.0 1285. proloh+ch3=proloh-1+ch4 2.20E+02 3.1 7600.0 1287. proloh+ch3=proloh-3+ch4 3.00E-01 4.0 8200.0 1288. proloh-3=c2h4+ch2oh 9.08E+42 -8.4 48600.0 1290. proloh-3=c2h4+ch2oh 9.08E+42 -8.4 48600.0 1291. proloh-3=c2h4+ch2oh 6.3DE+40 -8.8 48600.0 1292. proloh-3=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh-2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh-2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1296. proloh-2=proloh2d+ho2 1.63E+42 -8.9 47700.0 1295. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 1296. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 1299. proloh-1=proloh1d+	1283.	proloh+ho2=proloh-3+h2o2	2.64E-01	4.3	17265.0
1285. proloh+ch3=proloh-1+ch4 2.20E+02 3.1 7600.0 1286. proloh+ch3=proloh-3+ch4 3.00E-01 4.0 8200.0 1288. proloh-3=ch5+ch2o 1.63E+42 -8.9 47700.0 1289. proloh-3=ch5+ch2o 1.63E+42 -8.9 47700.0 1290. proloh-3=ch6+ch 9.0E+42 -9.1 46600.0 1291. proloh-3=proloh2d+th 6.47E+41 -8.6 46300.0 1292. proloh-3=proloh2d+tho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1293. proloh-2=proloh2d+tho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh2d+tho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh-2+c2=proloh2d+tho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1297. proloh-2+c2=proloh2d+tho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1298. proloh-1=c2h5cho+th 1.63E+42 -9.1 48600.0 1299. proloh-1=c2h5cho+th 1.63E+42 -9.1 48600.0 1290. proloh-1=c2h5cho+	1284.	proloh+ch3=nc3h7o+ch4	1.02E+00	3.6	8221.0
1286. prolohtch3=proloh-2+ch4 9.20E+02 2.9 8790.0 1287. proloh-3=ch3+ch2 3.00E-01 4.0 8200.0 1289. proloh-3=ch3+ch2oh 1.63E+42 -8.9 47700.0 1290. proloh-3=ch4+ch2oh 9.08E+42 -8.1 48600.0 1291. proloh-3=ch4+ch2oh 8.30E+40 -8.8 48600.0 1292. proloh-3=cp1oh2d+h0 8.30E+40 -8.8 48600.0 1292. proloh-3=cp1oh2d+h0 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh2d+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh-2=proloh2d+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1296. proloh-1=proloh2d+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh2d+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1290. proloh-1=ch5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1301. proloh-1=ch5cho+h <td< td=""><td>1285.</td><td>proloh+ch3=proloh-1+ch4</td><td>2.20E+02</td><td>3.1</td><td>7600.0</td></td<>	1285.	proloh+ch3=proloh-1+ch4	2.20E+02	3.1	7600.0
1287. prolohch3=proloh=3+ch4 3.00E=01 4.0 8200.0 1288. proloh=3=c2h5+ch20 1.63E+42 -8.9 47700.0 1289. proloh=3=c2h4+ch2oh 9.08E+42 -9.1 48600.0 1291. proloh=3=proloh2d+h 6.47E+41 -8.6 46800.0 1292. proloh=3=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1293. proloh=2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh=2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 Declared duplicate reaction 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh=2+o2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1294. proloh=1=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh=1=proloh1d+ho2 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1.301. proloh=1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1301. proloh=1=c2h5cho+ha 5.96E+40 -8.2 43700.0 1302. <td>1286.</td> <td>proloh+ch3=proloh-2+ch4</td> <td>9.20E+02</td> <td>2.9</td> <td>8790.0</td>	1286.	proloh+ch3=proloh-2+ch4	9.20E+02	2.9	8790.0
1288. proloh-3=c2h5+ch2o 1.63E+42 -8.9 47700.0 1290. proloh-3=cproloh2d+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1291. proloh-3=cproloh2d+h 8.30E+40 -8.8 46800.0 1292. proloh-3=cproloh2d+h 8.30E+40 -8.8 46800.0 1292. proloh-3=cproloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh1d+h 4.40E+35 -7.0 43100.0 Declared duplicate reaction 1295. proloh-2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1295. proloh-2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1296. proloh-2=proloh2d+ho2 1.63E+42 -8.9 47700.0 1297. proloh-2+02=proloh2d+ho2 1.63E+42 -8.9 47700.0 1298. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 4700.0 1299. proloh-1=ch5chch+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1300. proloh-1=ch5chch+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=c2h5chc+ha2 8.30E+40 -8.2 43700.0 1302. proloh-1=c2h5chc+ha2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1304. proloh-1=c2h5chc+ha2 1.50E+18	1287.	proloh+ch3=proloh-3+ch4	3.00E-01	4.0	8200.0
1289. proloh-3=c2h4+ch2ch 9.08E+42 -9.1 48600.0 1290. proloh-3=proloh2d+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1291. proloh-3=proloh2-2 5.96E+40 -8.2 43700.0 1293. proloh-3+c2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh1d+h 4.40E+35 -7.1 43300.0 Declared duplicate reaction 2.57E+37 -7.4 46700.0 1295. proloh-2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1297. proloh-2-proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1.00 5000.0 1.63E+42 -9.1 48600.0 1300. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1304. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1305. proloh-1=c2h5cho+h 1.48E+0 -5.9	1288.	proloh-3=c2h5+ch2o	1.63E+42	-8.9	47700.0
1290. proloh-3=proloh2d+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1291. proloh-3=c3h6+h 8.30E+40 -8.8 46800.0 1292. proloh-3=proloh-2 5.96E+40 -8.2 43700.0 1293. proloh-3+o2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 Declared duplicate reaction 1.58E+12 0.0 5000.0 Declared duplicate reaction 4.52E+35 -7.1 43300.0 1296. proloh-2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1297. proloh-2+o2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1300. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1301. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1304. proloh	1289.	proloh-3=c2h4+ch2oh	9.08E+42	-9.1	48600.0
1291. proloh-3=c3h6+oh 8.30E+40 -8.8 46800.0 1292. proloh-3=proloh2+ 5.96E+40 -8.2 43700.0 1294. proloh-2=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1295. proloh-2=proloh1d+h 4.52E+35 -7.1 43300.0 Declared duplicate reaction 0.0 5000.0 1296. proloh-2=proloh2d+h02 6.90E+11 0.0 5000.0 1297. proloh-2+02=proloh2d+h02 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+02=proloh2d+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-2+02=proloh1d+h02 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1301. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h2 8.30E+40 -8.8 46800.0 1304. proloh-1=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 1120.0 0.0 1304. proloh-1=c2h5cho+h2 1.90E+13 0.0 0.0 1304. proloh-1=c2h5cho+h2 1.90E+13 0.0 0.0 0.0<	1290.	proloh-3=proloh2d+h	6.47E+41	-8.6	46300.0
1292. proloh-3=proloh-2 5.96E+40 -8.2 43700.0 1293. proloh-3+o2=proloh24+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh1d+h 4.0E+35 -7.0 43100.0 Declared duplicate reaction 1 52E+35 -7.1 43300.0 Declared duplicate reaction 2.57E+37 -7.4 46700.0 1296. proloh-2=proloh1d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1299. proloh-2=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1.63E+42 -9.1 48600.0 1300. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -9.1 48600.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1304. proloh-1=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=c2h5cho+h2 1.50E+18 -6.2 19100.0 1304. proloh-1+c2=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1305. proloh-2=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 <t< td=""><td>1291.</td><td>proloh-3=c3h6+oh</td><td>8.30E+40</td><td>-8.8</td><td>46800.0</td></t<>	1291.	proloh-3=c3h6+oh	8.30E+40	-8.8	46800.0
1293. proloh-3-02=proloh2d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1294. proloh-2=proloh1d+h 4.06P435 -7.0 43100.0 Declared duplicate reaction 1295. proloh-2=proloh2d+h 4.52E+35 -7.1 43300.0 1295. proloh-2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1297. proloh-2+o2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+o2=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+12 0.0 5000.0 1290. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 Declared duplicate reaction 100. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1304. proloh-1+02=proloh1d+h02 8.90E+40 -8.2 43700.0 1305. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1309. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1310. nc3h7o+h=c2h5cho+h	1292.	proloh-3=proloh-2	5.96E+40	-8.2	43700.0
1294. proloh-2=prolohld+h 4.40E+35 -7.0 43100.0 Declared duplicate reaction 1295. proloh-2=prolohld+h 4.52E+35 -7.1 43300.0 1295. proloh-2=prolohld+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1297. proloh-2=prolohld+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1299. proloh-1=prolohld+h 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=prolohld+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1 1.63E+42 -8.9 47700.0 1300. proloh-1=prolohld+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1304. proloh-1=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 120.0 1305. proloh-1+c2=prolohld+h22 1.50E+18 -1.8 120.0 1304. proloh-1+c2=c2h5cho+h22 1.50E+18 -1.8 120.0 1305. proloh-1+c2=prolohld+h22 1.00E+13 0.0 0.0 1306. nc3h70=c2h5cho+h20 5.18E+31 -6.2 1910.0 1308. nc3h70+h=c2h5cho+h20 3.00E+11 <td>1293.</td> <td>pro1oh-3+o2=pro1oh2d+ho2</td> <td>1.58E+12</td> <td>0.0</td> <td>5000.0</td>	1293.	pro1oh-3+o2=pro1oh2d+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
Declared duplicate reaction 1295. proloh-2=prolohld+h 4.52E+35 -7.1 43300.0 Declared duplicate reaction 2.57E+37 -7.4 46700.0 1296. proloh-2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+o2=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=prolohld+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1.00E+142 -9.1 48600.0 1300. proloh-1=prolohld+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h2 8.30E+40 -8.2 43700.0 1304 proloh-1+c2=c2h5cho+h2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=prolohld+h2 8.90E+03 2.1 470.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h2c2b5cho+h22 3.00E+11 0.0 0.0 1310. nc3h7o+b2=c2h5cho+h22 3.00E+11 <t< td=""><td>1294.</td><td>proloh-2=prolohld+h</td><td>4.40E+35</td><td>-7.0</td><td>43100.0</td></t<>	1294.	proloh-2=prolohld+h	4.40E+35	-7.0	43100.0
1295. proloh-2=prolohld+h 4.52E+35 -7.1 43300.0 Declared duplicate reaction 2.57E+37 -7.4 46700.0 1297. proloh-2+o2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+o2=prolohd+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=prolohld+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+b 1.50E+18 -1.8 1120.0 1304. proloh-1+c2=c2h5cho+b2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=proloh1d+ho2 8.90E+03 2.1 470.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1310. nc3h7o+h2=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1311. nc3h7o+h2=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0		Declared duplicate reaction			
Declared duplicate reaction 1296. proloh-2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1297. proloh-2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+o2=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 1.63E+42 -9.1 48600.0 1300. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h 5.96E+40 -8.2 43700.0 1304. proloh-1+c2=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=proloh1d+ho2 8.90E+03 2.1 470.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h 1.44E+29 -5.9 2200.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1310. nc3h7o+b=c2h5cho+h20 3.04E+10 0.0 0.0 1311. nc3h7o+02=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0<	1295.	proloh-2=prolohld+h	4.52E+35	-7.1	43300.0
1296. proloh-2=proloh2d+h 2.57E+37 -7.4 46700.0 1297. proloh-2+o2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+o2=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=c2h5choth 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5choth 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5choth2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1304. proloh-1+c2=proloh1d+ho2 8.90E+03 2.1 4700.0 1305. proloh-1+c2=proloh1d+ho2 8.90E+03 2.1 4700.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+ha 1.44E+29 -5.9 22200.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1310. nc3h7o+b=c2h5cho+h20 3.02E+14 0.0 5017.0 1311. nc3h7o+b2=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+b2=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0		Declared duplicate reaction			
1297. proloh-2+o2=proloh2d+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0 1298. proloh-2+o2=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 1300. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h2 8.30E+40 -8.8 46800.0 1304. proloh-1+c2=c2h5cho+ho2 8.90E+03 2.1 4700.0 1305. proloh-1+c2=proloh1d+ho2 8.90E+03 2.1 4700.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h 1.50E+18 -1.8 1120.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1311. nc3h7o+ba=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+ha=c2h5cho+h20 3.00E+13 0.0 0.0 1311. nc3h7o+ba=c2h5cho+h20 3.00E+13 0.0 0.0	1296.	proloh-2=proloh2d+h	2.57E+37	-7.4	46700.0
1298. proloh-2+o2=proloh1d+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0 1299. proloh-1=proloh1d+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 1300. proloh-1=proloh1d+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h 8.30E+40 -8.2 43700.0 1304. proloh-1=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=ch5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1309. nc3h7o+h2=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1310. nc3h7o+h2=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1311. nc3h7o+h2=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+h2=ch5cho+h2 3.00	1297.	pro1oh-2+o2=pro1oh2d+ho2	6.90E+11	0.0	5000.0
1299. proloh-1=prolohld+h 1.63E+42 -8.9 47700.0 Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=prolohld+h 9.08E+42 -9.1 48600.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1304. proloh-1=c2h5cho+h2 1.50E+18 -8.8 46800.0 1305. proloh-1+c2=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1306. nc3h70=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1307. nc3h70=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h70+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1309. nc3h70+h=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1310. nc3h70+ho2=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1311. nc3h70+ho2=c2h5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h70+ho2=ch5cho+h2 3.00E+11 0.0 0.0 1314. proloh-3=proloh-1 1.54E+53 <td>1298.</td> <td>pro1oh-2+o2=pro1oh1d+ho2</td> <td>1.58E+12</td> <td>0.0</td> <td>5000.0</td>	1298.	pro1oh-2+o2=pro1oh1d+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
Declared duplicate reaction 1300. proloh-1=prolohld+h Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 8.30E+40 -8.8 46800.0 1303. proloh-1=c2h5cho+h2 8.30E+40 -8.2 43700.0 1304. proloh-1+c2=psl5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=prolohld+ho2 8.90E+03 2.1 470.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h 1.44E+29 -5.9 2220.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=ch2oh+c2h5 1.00E+13 0.0 0.0 1309. nc3h7o+h=c2h5cho+h20 4.82E+14 0.0 5017.0 1311. nc3h7o+0=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+ho2=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1314. proloh-3=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h70 8.17E+06	1299.	proloh-l=prolohld+h	1.63E+42	-8.9	47700.0
1300. proloh-1=prolohld+h Declared duplicate reaction 9.08E+42 -9.1 48600.0 1301. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 8.30E+40 -8.8 46800.0 1303. proloh-1=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1304. proloh-1+c2=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=prolohld+ho2 8.90E+03 2.1 470.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h 1.44E+29 -5.9 22200.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h20 1.00E+13 0.0 0.0 1309. nc3h7o+h=c2h5cho+h20 8.43E+09 0.0 219.0 1310. nc3h7o+h0=c2h5cho+h20 8.43E+09 0.0 219.0 1311. nc3h7o+h0=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+h0=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+h0=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 1.0 1314. proloh-3=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1314. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 <td></td> <td>Declared duplicate reaction</td> <td></td> <td></td> <td></td>		Declared duplicate reaction			
Declared duplicate reaction 1301. proloh-1=c2h5cho+h 6.47E+41 -8.6 46300.0 1302. proloh-1=c2h5cho+h 8.30E+40 -8.8 46800.0 1303. proloh-1=c2h5cho+ho2 5.96E+40 -8.2 43700.0 1304. proloh-1+c2=c2h5cho+ho2 1.50E+18 -1.8 1120.0 1305. proloh-1+c2=proloh1d+ho2 8.90E+03 2.1 470.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h 1.44E+29 -5.9 22200.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1309. nc3h7o+b=c2h5cho+h20 8.43E+14 0.0 5017.0 1310. nc3h7o+h0=c2h5cho+h20 8.43E+14 0.0 5017.0 1311. nc3h7o+h0=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+h0=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1314. proloh-3=nc3h70 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=nc3h70 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h70 8.17E+06 0.0 23290.	1300.	proloh-1=prolohld+h	9.08E+42	-9.1	48600.0
1301.proloh-1=c2h5cho+h $6.47E+41$ -8.6 46300.0 1302.proloh-1=c2h5cho+h2 $8.30E+40$ -8.8 46800.0 1303.proloh-1=c2h3oh+ch3 $5.96E+40$ -8.2 4700.0 1304.proloh-1+c2=c2h5cho+h2 $1.50E+18$ -1.8 1120.0 1305.proloh-1+c2=proloh1d+h2 $8.90E+03$ 2.1 470.0 1306.nc3h7o=c2h5cho+h $1.44E+29$ -5.9 22200.0 1307.nc3h7o=c2h5cho+h $1.00E+13$ 0.0 0.0 1308.nc3h7o+h=c2h5cho+h2 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1309.nc3h7o+h=c2h5cho+h2 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1311.nc3h7o+cb=c2h5cho+h2 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1312.nc3h7o+h2=c2h5cho+h22 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1311.nc3h7o+h2=c2h5cho+h22 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1312.nc3h7o+h3=cahch22 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1313.proloh-3=proloh-1 $2.05E+35$ -8.0 38670.0 1314.proloh-2=proloh-1 $1.54E+53$ -13.3 44990.0 1315.proloh-2=proloh-1 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1314.proloh-2=nc3h70 $3.40E+08$ 0.0 22970.0 1315.proloh2+ch=proloh2d $1.00E+13$ 0.0 0.0 1318.c3h5-a+oh=proloh2d $1.00E+10$ 0.0 0.0 1320.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $1.00E+10$ 2.5 980.00 1321.proloh2d+h=h2+ch		Declared duplicate reaction			
1302.proloh-1=c2h5+ch2o $8.30E+40$ -8.8 46800.0 1303.proloh-1=c2h3oh+ch3 $5.96E+40$ -8.2 43700.0 1304.proloh-1+c2=c2h5cho+ho2 $1.50E+18$ -1.8 1120.0 1305.proloh-1+c2=proloh1d+ho2 $8.90E+03$ 2.1 470.0 1306.nc3h7o=c2h5cho+h $1.44E+29$ -5.9 22200.0 1307.nc3h7o=c2h5cho+h $1.44E+29$ -5.9 22200.0 1307.nc3h7o+c2h5cho+h2 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1309.nc3h7o+h=c2h5cho+h2 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1311.nc3h7o+oh=c2h5cho+h20 $8.43E+09$ 0.0 219.0 1312.nc3h7o+ho2=c2h5cho+h20 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1313.proloh-3=pc3h7o $1.88E+07$ 0.0 1660.0 1314.proloh-3=nc3h7o $1.54E+53$ -13.3 44990.0 1315.proloh-2=pc1oh-1 $1.54E+53$ -13.3 44990.0 1316.proloh-2=nc3h7o $8.17E+06$ 0.0 22970.0 1318.c3h5-a+oh=proloh2d $1.00E+13$ 0.0 0.0 1319.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $1.00E+13$ 0.0 0.0 1320.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $1.00E+16$ 2.0 1450.0 1321.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $1.00E+16$ 2.0 1450.0 1322.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 1321.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 132	1301.	proloh-l=c2h5cho+h	6.47E+41	-8.6	46300.0
1303.proloh-1=c2h3oh+ch35.96E+40-8.243700.01304.proloh-1+o2=c2h5cho+ho21.50E+18-1.81120.01305.proloh-1+o2=proloh1d+ho2 $8.90E+03$ 2.1470.01306.nc3h7o=c2h5cho+h $1.44E+29$ -5.922200.01307.nc3h7o=c2h5cho+h $1.44E+29$ -5.922200.01308.nc3h7o+h=ch2oh+c2h5 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1309.nc3h7o+h=ch5cho+h2 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1310.nc3h7o+h=c2h5cho+h2o $8.43E+09$ 0.0 219.0 1311.nc3h7o+h02=c2h5cho+h2o2 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1312.nc3h7o+h02=c2h5cho+h2o2 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1313.proloh-3=proloh-1 $2.05E+35$ -8.0 38670.0 1314.proloh-3=proloh-1 $1.54E+53$ -13.3 44990.0 1315.proloh-2=proloh-1 $1.54E+53$ -13.3 44990.0 1316.proloh-2=nc3h70 $8.17E+06$ 0.0 22970.0 1318.c3h5-a+oh=proloh2d $1.00E+13$ 0.0 0.0 1320.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $1.00E+16$ 2.0 1450.0 1321.proloh2d+h=h2+ch2chchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 1322.proloh2d+o=h+ch2chchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 1321.proloh2d+o=h+ch2chchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 1322.proloh2d+o=h+ch2chchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 1323.proloh2	1302.	proloh-l=c2h5+ch2o	8.30E+40	-8.8	46800.0
1304.proloh-1+o2=c2h5cho+ho21.50E+18-1.81120.01305.proloh-1+o2=proloh1d+ho2 $8.90E+03$ 2.1 470.0 1306.nc3h7o=c2h5cho+h $1.44E+29$ -5.9 22200.0 1307.nc3h7o=c2h5cho+h $1.44E+29$ -5.9 22200.0 1308.nc3h7o+=c2h5cho+c $5.18E+31$ -6.2 19100.0 1309.nc3h7o+h=c2h5cho+h2 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1310.nc3h7o+h=c2h5cho+h2 $1.00E+13$ 0.0 0.0 1311.nc3h7o+ho2=c2h5cho+h2 $8.43E+09$ 0.0 219.0 1312.nc3h7o+ho2=c2h5cho+h2 $3.00E+11$ 0.0 0.0 1313.proloh-3=proloh-1 $2.05E+35$ -8.0 38670.0 1314.proloh-3=nc3h70 $1.88E+07$ 0.0 6800.0 1315.proloh-2=nc3h70 $3.40E+08$ 0.0 22970.0 1318.c3h5-a+oh=proloh2d $1.00E+13$ 0.0 0.0 1319.proloh24+h=2+ch2chchoh $1.00E+13$ 0.0 0.0 1320.proloh24+h=2+ch2chchoh $1.00E+16$ 2.5 9800.0 1321.proloh24+h=2+ch2chchoh $1.00E+16$ 2.0 1450.0 1322.proloh24+o=o+t+2chchchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 1323.proloh24+o=o+t+2chchchoh $9.80E-01$ 3.5 306.0 1324.proloh24+o=o+t+2chchchoh $2.77E+13$ 0.0 0.0 1324.proloh24+o=o+t+2chchoh+12 $2.77E+13$ 0.0 0.0 <td>1303.</td> <td>proloh-1=c2h3oh+ch3</td> <td>5.96E+40</td> <td>-8.2</td> <td>43700.0</td>	1303.	proloh-1=c2h3oh+ch3	5.96E+40	-8.2	43700.0
1305. proloh-1+o2=prolohld+ho2 8.90E+03 2.1 470.0 1306. nc3h7o=c2h5cho+h 1.44E+29 -5.9 22200.0 1307. nc3h7o=c2h5cho+h 1.00E+13 0.0 0.0 1308. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1309. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1310. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1311. nc3h7o+ob=c2h5cho+h20 8.43E+09 0.0 219.0 1312. nc3h7o+h22=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1311. nc3h7o+02=c2h5cho+h20 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+h3=roloh-1 2.05E+35 -8.0 38670.0 1314. proloh-3=ro3h7o 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 22970.0 1317. proloh2+h=2c2chchoh 1.00E+13 0.0 0.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13	1304.	proloh-1+o2=c2h5cho+ho2	1.50E+18	-1.8	1120.0
1306. $nc3h7o=c2h5cho+h$ $1.44E+29$ -5.9 22200.0 1307. $nc3h7o=c2h5cho+h2$ $5.18E+31$ -6.2 19100.0 1308. $nc3h7o+h=c2b5cho+2b5$ $1.00E+13$ 0.0 0.0 1309. $nc3h7o+h=c2h5cho+h2$ $1.00E+13$ 0.0 0.0 1310. $nc3h7o+h=c2h5cho+h20$ $4.82E+14$ 0.0 5017.0 1311. $nc3h7o+ho2=c2h5cho+ho2$ $8.43E+09$ 0.0 219.0 1312. $nc3h7o+ho2=c2h5cho+ho2$ $3.00E+11$ 0.0 0.0 1313. $proloh-3=proloh-1$ $2.05E+35$ -8.0 38670.0 1314. $proloh-3=nc3h7o$ $1.88E+07$ 0.0 16680.0 1315. $proloh-2=proloh-1$ $1.54E+53$ -13.3 44990.0 1316. $proloh-2=nc3h7o$ $8.17E+06$ 0.0 22390.0 1317. $proloh-1=nc3h7o$ $3.40E+08$ 0.0 22970.0 1318. $c3h5-a+0=proloh2d$ $1.00E+10$ 0.0 0.0 1320. $proloh2d+h=h2+ch2chchoh$ $1.00E+105$ 2.5 9800.0 1321. $proloh2d+h=h2+ch2chchoh$ $1.00E+105$ 2.5 9800.0 1322. $proloh2d+ch=h2chchoh$ $9.80E-01$ 3.5 306.0 1322. $proloh2d+o=ch+ch2chchoh$ $6.00E+10$ 0.7 7630.0 1324. $proloh1d+h=ch2chchoh+h20$ $2.77E+13$ 0.0 0.0 1324. $proloh1d+h=ch2chchoh+h20$ $5.36E+04$ 2.5 8750.0	1305.	pro1oh-1+o2=pro1oh1d+ho2	8.90E+03	2.1	470.0
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1306.	nc3h7o=c2h5cho+h	1.44E+29	-5.9	22200.0
$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	1307.	nc3h7o=c2h5+ch2o	5.18E+31	-6.2	19100.0
1309. nc3h7o+h=c2h5cho+h2 1.00E+13 0.0 0.0 1310. nc3h7o+oh=c2h5cho+h2o 4.82E+14 0.0 5017.0 1311. nc3h7o+oh=c2h5cho+h2o 8.43E+09 0.0 219.0 1312. nc3h7o+b2=c2h5cho+h2o2 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+b2=c2h5cho+h2o2 3.00E+11 0.0 0.0 1312. nc3h7o+b2=c2h5cho+h2o2 3.00E+11 0.0 0.0 1313. proloh-3=proloh-1 2.05E+35 -8.0 38670.0 1314. proloh-3=nc3h7o 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 22970.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 1.00E+13 0.0 0.0 1320. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 1.00E+10 0.0 0.0 1321. proloh2d+ch=ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1322. proloh2d+ca=ch4ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+ca=ch4ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1323. pro	1308.	nc3h7o+h=ch2oh+c2h5	1.00E+13	0.0	0.0
1310. nc3h7o+oh=c2h5cho+h2o 4.82E+14 0.0 5017.0 1311. nc3h7o+o2=c2h5cho+ho2 8.43E+09 0.0 219.0 1312. nc3h7o+ho2=c2h5cho+ho2 3.00E+11 0.0 0.0 1313. proloh-3=proloh-1 2.05E+35 -8.0 38670.0 1314. proloh-3=nc3h7o 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 22290.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1320. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 1.00E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+cb3=ch4-ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+cb3=ch4-ch2chchoh+12o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+12o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+12o 2.36E+04 2.5 8750.0 <td>1309.</td> <td>nc3h7o+h=c2h5cho+h2</td> <td>1.00E+13</td> <td>0.0</td> <td>0.0</td>	1309.	nc3h7o+h=c2h5cho+h2	1.00E+13	0.0	0.0
1311. nc3h7o+o2=c2h5cho+ho2 8.43E+09 0.0 219.0 1312. nc3h7o+ho2=c2h5cho+h2o2 3.00E+11 0.0 0.0 1313. proloh-3=proloh-1 2.05E+35 -8.0 38670.0 1314. proloh-3=nc3h7o 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 23290.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 1.00E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+oh=h2o+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0	1310.	nc3h7o+oh=c2h5cho+h2o	4.82E+14	0.0	5017.0
1312. nc3h7o+ho2=c2h5cho+h2o2 3.00E+11 0.0 0.0 1313. proloh-3=proloh-1 2.05E+35 -8.0 38670.0 1314. proloh-3=proloh-1 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 23290.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 4.10E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+b=h2+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0	1311.	nc3h7o+o2=c2h5cho+ho2	8.43E+09	0.0	219.0
1313. proloh-3=proloh-1 2.05E+35 -8.0 38670.0 1314. proloh-3=nc3h7o 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 23290.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1319. proloh2d+n=h2+ch2chchoh 4.10E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+ch=ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2+ch=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+c=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0	1312.	nc3h7o+ho2=c2h5cho+h2o2	3.00E+11	0.0	0.0
1314. proloh-3=nc3h7o 1.88E+07 0.0 16680.0 1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 23290.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 1.00E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+coh=chchchch 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0	1313.	proloh-3=proloh-1	2.05E+35	-8.0	38670.0
1315. proloh-2=proloh-1 1.54E+53 -13.3 44990.0 1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 23290.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1320. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 1.00E+05 2.5 9800.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 2.78E+13 0.0 0.0	1314.	proloh-3=nc3h7o	1.88E+07	0.0	16680.0
1316. proloh-2=nc3h7o 8.17E+06 0.0 23290.0 1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 4.10E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+b=h2+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 5.36E+04 2.5 8750.0	1315.	proloh-2=proloh-1	1.54E+53	-13.3	44990.0
1317. proloh-1=nc3h7o 3.40E+08 0.0 22970.0 1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 4.10E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+on=h2o+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 5.36E+04 2.5 8750.0	1316.	proloh-2=nc3h7o	8.17E+06	0.0	23290.0
1318. c3h5-a+oh=proloh2d 1.00E+13 0.0 0.0 1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 4.10E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+oh=h2o+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch=ch+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 5.36E+04 2.5 8750.0	1317.	proloh-1=nc3h7o	3.40E+08	0.0	22970.0
1319. proloh2d+h=h2+ch2chchoh 4.10E+05 2.5 9800.0 1320. proloh2d+oh=h2o+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 5.36E+04 2.5 8750.0	1318.	c3h5-a+oh=pro1oh2d	1.00E+13	0.0	0.0
1320. proloh2d+oh=h2o+ch2chchoh 1.00E+06 2.0 1450.0 1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E=01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2o 5.36E+04 2.5 8750.0	1319.	proloh2d+h=h2+ch2chchoh	4.10E+05	2.5	9800.0
1321. proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh 9.80E-01 3.5 306.0 1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2 5.36E+04 2.5 8750.0	1320.	proloh2d+oh=h2o+ch2chchoh	1.00E+06	2.0	1450.0
1322. proloh2d+o=oh+ch2chchoh 6.00E+10 0.7 7630.0 1323. proloh1d+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. proloh1d+h=ch2chchoh+h2 5.36E+04 2.5 8750.0	1321.	proloh2d+ch3=ch4+ch2chchoh	9.80E-01	3.5	306.0
1323. prolohld+oh=ch2chchoh+h2o 2.77E+13 0.0 0.0 1324. prolohld+h=ch2chchoh+h2 5.36E+04 2.5 8750.0	1322.	proloh2d+o=oh+ch2chchoh	6.00E+10	0.7	7630.0
1324. prolohld+h=ch2chchoh+h2 5.36E+04 2.5 8750.0	1323.	prolohld+oh=ch2chchoh+h2o	2.77E+13	0.0	0.0
	1324.	prolohld+h=ch2chchoh+h2	5.36E+04	2.5	8750.0

1325.	prolohld+ho2=c2h5cho+ho2	1.49E+05	1.7	6810.0
1326.	prolohld+hcooh=c2h5cho+hcooh	2.81E-02	3.3	-4510.0
1327.	proloh1d=c2h5cho	8.59E+11	0.3	55900.0
1328.	pro2oh1d=c3h5-t+oh	7.37E+19	-0.9	109100.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+13	0.0	0.0
1329	pro2oh1d=ch3coch3	9.66E+23	-3.3	59987 5
1330	pro2oh1d+ho2=ch3coch3+ho2	1 49E+05	1 7	6810 0
1331	pro2oh1d+o=ch2cohch2+oh	1 7/0+11	0.7	5900 0
1001.		1.745111	0.7	0510.0
1332.	prozonia+n=cnzconcnz+nz	1.74E+05	2.5	2510.0
1333.	pro2on1d+on=cn2conch2+h2o	3.00E+06	2.0	-298.0
1334.	pro2oh1d+ho2=ch2cohch2+h2o2	9.60E+03	2.6	13900.0
1335.	pro2oh1d+ch3=ch2cohch2+ch4	2.22E+00	3.5	5670.0
1336.	ch2cohch2+ho2=ch2o+ch2cho+oh	1.45E+11	0.0	0.0
1337.	ch3coch3(+M)=ch3co+ch3(+M)	7.02E+21	-1.6	84680.0
	Low pressure limit: 0.70130E+90 -0.20380E+02	0.10722E+	06	
	TROE centering: 0.86000E+00 0.10000E+11	0.41600E+	03 0.32	900E+10
1338.	ch3coch3+o2=ch3coch2+ho2	6.03E+13	0.0	48500.0
1339.	ch3coch3+o=ch3coch2+oh	5.13E+11	0.2	4890.0
1340	ch3coch3+h=ch3coch2+h2	9 80E+05	2 4	5160 0
1341	ch3coch3+oh=ch3coch2+h2o	6 08E+08	1 4	2560.0
1011.	Dealared duplicate reaction	0.001100	1.1	2300.0
1240	bectated dupticate teaction	0.0000110	0 0	0.0
1342.	Cn3CoCn3+on=Cn3CoCn2+n2o	8.00E+10	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction			
1343.	ch3coch3+oh=ch3cooh+ch3	6.00E+09	0.0	3500.0
1344.	ch3coch3+ho2=ch3coch2+h2o2	3.97E-03	4.5	8372.0
1345.	ch3coch3+ch3=ch3coch2+ch4	9.50E+03	2.5	8400.0
1346.	ch3coch3+ch3=ch3co+c2h6	5.70E+00	4.0	41700.0
1347.	ch3coch2=ch2co+ch3	6.98E+47	-10.0	59250.0
	Declared duplicate reaction			
1348.	ch3coch2=ch2co+ch3	1.98E+25	-3.8	43940.0
	Declared duplicate reaction			
1349.	ch3coch2+o2=acetoo2	1.20E+11	0.0	-1100.0
1350	acetoo2+bo2=c3ket21+o2	2 29E+11	0 0	-1790 0
1351	acetoo2+ho2=c3ket21+bo2	2.20E+11 2.41E+12	0.0	9936 0
1252		1 400116	1 6	1960.0
1252.		1.406+10	-1.0	1960.0
1254		2 728-20	-1.0	17060.0
1354.	aceloo=ch2o+ch3co	3./3E+20	-2.2	1/200.0
1355.	acetoo+o2=ch3cocho+ho2	8.43E+09	0.0	220.0
1356.	ch3coco+o2=co2+co2+ch3	3.00E+10	0.0	2870.0
1357.	ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co	2.00E+13	0.0	0.0
1358.	ch3co+hco=ch3cocho	1.00E+13	0.0	0.0
1359.	ch3cocho+h=ch3coco+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
1360.	ch3cocho+oh=ch3coco+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0
1361.	ch3cocho+o=ch3coco+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
1362.	ch3cocho+ch3=ch3coco+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
1363.	ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
1364	ch3co+co=ch3coco	1.50E+11	0.0	3000.0
1365	ch2cco+h=c2h3co	8 00E+11	0.0	2000.0
1366	ch2ccctoh=>hccccth2c	2 201111	2.0	2780.0
1200.		2.201100	2.0	1000.0
1267.	cnzcco+n=>nccco+nz	8.20E+05	2.0	12280.0
1000.		4.0UE+10	-1.4	TOTO.0
1369.	cnocn/cno+o2=cnocn/co+no2	4.UUE+13	U.5	42200.0
1370.	choch2cho+oh=choch2co+h2o	5.40E+10	U.8	-340.0
1371.	choch2cho+h=choch2co+h2	8.00E+13	0.0	4200.0
1372.	choch2cho+o=choch2co+oh	1.00E+13	0.0	1790.0
1373.	choch2cho+ho2=choch2co+h2o2	5.60E+12	0.0	13600.0
1374.	choch2cho+ch3o=choch2co+ch3oh	2.30E+11	0.0	1280.0
1375.	choch2cho+ch3o2=choch2co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	9500.0

1376.	choch2co=>ch2cho+co		1.83E+15	-0.7	12910.0
1377.	ch2chchco+h=cjhchchco+h2		4.21E-03	4.6	2583.0
1378.	ch2chchco+oh=cjhchchco+h2o		1.01E+13	0.0	5955.0
1379.	ch2chchco+ch3=cjhchchco+ch4		3.31E+00	3.7	9500.0
1380.	ch2chchco+o=cjhchchco+oh		1.20E+11	0.7	8959.0
1381.	ch2chchco+ho2=cjhchchco+h2o2		8.50E+13	0.0	30430.0
1382.	ch2chchco+h=co+c3h5-a		1.10E+13	0.0	3400.0
1383.	ch2chchco+h=c2h4+hcco		1.10E+13	0.0	3400.0
1384.	c2h2+hcco=cjhchchco		1.61E+40	-8.6	20331.0
1385.	c2h3+hcco=ch2chchco		8.00E+12	0.0	0.0
1386.	ch3+c2h3co=c2h5chco		1.00E+13	0.0	0.0
1387.	c4ald3oxo+o2=mecomeco+ho2		2.00E+13	0.5	42200.0
1388.	c4ald3oxo+oh=mecomeco+h2o		2.69E+10	0.8	-340.0
1389.	c4ald3oxo+h=mecomeco+h2		4.00E+13	0.0	4200.0
1390.	c4ald3oxo+o=mecomeco+oh		5.00E+12	0.0	1790.0
1391.	c4ald3oxo+ho2=mecomeco+h2o2		2.80E+12	0.0	13600.0
1392.	c4ald3oxo+ch3o=mecomeco+ch3oh		1.15E+11	0.0	1280.0
1393.	c4ald3oxo+ch3o2=mecomeco+ch3o2h		1.00E+12	0.0	9500.0
1394.	mecomeco=>ch3coch2+co		1.83E+15	-0.7	12910.0
1395.	c4ald2oxo+o2=c2h5coco+ho2		2.00E+13	0.5	42200.0
1396.	c4ald2oxo+oh=c2h5coco+h2o		2.69E+10	0.8	-340.0
1397.	c4ald2oxo+h=c2h5coco+h2		4.00E+13	0.0	4200.0
1398.	c4ald2oxo+o=c2h5coco+oh		5.00E+12	0.0	1790.0
1399.	c4ald2oxo+ho2=c2h5coco+h2o2		2.80E+12	0.0	13600.0
1400.	c4ald2oxo+ch3o=c2h5coco+ch3oh		1.15E+11	0.0	1280.0
1401.	c4ald2oxo+ch3o2=c2h5coco+ch3o2h		1.00E+12	0.0	9500.0
1402.	c2h5coco=>c2h5co+co		1.83E+15	-0.7	12910.0
1403.	choc2h4cho+o2=choc2h4co+ho2		4.00E+13	0.5	42200.0
1404.	choc2h4cho+oh=choc2h4co+h2o		5.40E+10	0.8	-340.0
1405.	choc2h4cho+h=choc2h4co+h2		8.00E+13	0.0	4200.0
1406	choc2h4cho+o=choc2h4co+oh		1 00E+13	0.0	1790 0
1407	choc2h4cho+ho2=choc2h4co+h2o2		5 60E+12	0.0	13600 0
1408	choc2h4cho+ch3o=choc2h4co+ch3oh		2 30E+11	0.0	1280 0
1409.	choc2h4cho+ch3o2=choc2h4co+ch3o2h		2 00E+12	0.0	9500.0
1410	choc2h4co=>pc2h4cho+co		1 83E+15	-0.7	12910.0
1/11	ng/h10=ng/h9+h		1 592+16	0.7	97970.0
1411.	nc4h10-pc4h9+h		1 00E+16	0.0	9/9/0.0
1412.	nc4h10+c2=nc4h0+hc2		3 975+13	0.0	50970 0
1413.	nc4h10+o2=pc4h3+ho2		7 0/E+12	0.0	47600.0
1414.	nc4n10+02-5c4n9+n02		7.94ETIS 2.72E+15	0.0	47090.0
1413.	IIC4IIIO(TM) = C2IISTC2IIS(TM)	0 0000000000000000000000000000000000000	2./2ETIJ	0.0	/3010.0
	The sector of th	0.15000001004	0.49570E105	0 10	0000.11
1416	nadh10(LM)=na2h7Lah2(LM)	0.130006+04	4 20E 14	0.10	COOOD O
1410.	Teu proceuro limit. 0 52400EL19	0 0000000000000000000000000000000000000	4.205714	0.0	09900.0
	The sector in th	0.00000E+00	0.429J9E+0J	0 10	0000.11
1 4 1 7	IROE Centering: 0.72000E+00	0.130006+04	1.00000E-09	0.10	COOD O
141/.	nc4n10+n=pc4n9+n2		1.88E+U5	2.8	6280.0
1418.	nC4nl0+n=sC4n9+n2		2.60E+06	2.4	44/1.0
1419.	nc4n10+o=pc4n9+on		1.93E+05	2.7	3/16.0
1420.	nc4hlU+o=sc4h9+oh		9.54E+04	2.7	2106.0
1421.	nc4h10+oh=pc4h9+h2o		2.73E+07	1.8	868.0
1422.	nc4h1U+oh=sc4h9+h2o		1.41E+10	0.9	505.0
1423.	nc4h10+ho2=pc4h9+h2o2		1.68E+13	0.0	20440.0
1424.	nc4n1U+ho2=sc4h9+h2o2		1.12E+13	0.0	T/690.0
1425.	nc4n10+ch3=pc4h9+ch4		6.UUE-01	4.0	8200.0
1426.	nc4h1U+ch3=sc4h9+ch4		4.00E+11	0.0	9600.0
1427.	nc4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh		4.34E+11	0.0	6460.0
1428.	nc4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh		2.90E+11	0.0	4570.0
1429.	nc4h10+ch2oh=pc4h9+ch3oh		1.98E+02	3.0	13970.0

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=nc4h9+t2c4h8	8 00E+01	33	19840 0
1444	nc4h10+c4h713=sc4h9+t2c4h8	5 33E+01	3.3	18170 0
1445	nc4h10+c4h1715=5c4h5+c2c4h6	3 165+11	0.0	7000 0
1445.	nc4h10+pc4h9o=pc4h9+pc4h9oh	2 100111	0.0	5000.0
1440.	nc4n10+pc4n90-sc4n9+pc4n90n	2.196711	0.0	2000.0
144/.	nc4n10+sc4n90=pc4n9+sc4n90n	3.10E+11 2.10E+11	0.0	7000.0
1448.	nc4n10+sc4n90=sc4n9+sc4n90n	2.196+11	0.0	2000.0
1449.	pc4n9=sc4n9	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	35/10.0
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	sc(h)+oh=c(2c(h)+h)(2c)	2.10E+13	0.0	0.0
1477	sc4h9+b=c4b8=1+b2	5 00F+13	0.0	0.0
1/70	sc(h)+h=c(h)(h)(h)	5 008+13	0.0	0.0
1/70	sc(h)+h=c(2c(h)+h)	5 008+13	0.0	0.0
1/80	sc/h0+ch3=c/h0+1+ch/	1 005+12	0.0	0.0
1/01	$3C_{11}$, C_{11} , $C_{$	1 005110	0.0	0.0
1401.	5C4H5TCH5=C2C4H0TCH4	1.00E+12	0.0	0.0
1402.	SC4H9+CH5-CZC4H8+CH4	1.006+12	0.0	0.0
1403.		3.02E+13	0.0	0133U.U
1484.	C2C4N5=C4N5+N2	1.005+13	0.0	0000.0
1485.	C2C4n8=C4n/13+h	1.06E+85	-20.0	132/8/.0
1486.	c3n5-s+ch3(+m)=c2c4h8(+m)	2.50E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit: 0.42700E+59 -0.11940E+02	U.97698E+	04	

	TROE centering: h2o co co2 ch4 c2h6 h2 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar	0.17500E+(Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	00 0.13406E+04 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	0.60000E+05	0.10140E+05
1487. 1488. 1489. 1490. 1491. 1492. 1493. 1494. 1495. 1496. 1496. 1497. 1498. 1499. 1500. 1501. 1502. 1503. 1504.	c2c4h8=c3h5-a+ch c2c4h8+0=c4h713 c2c4h8+0=c4h713 c2c4h8+0=c4h713 c2c4h8+0=c4h713 c2c4h8+0=c4h713 c2c4h8+0=c4h713 c2c4h8+0=c4h713 c2c4h8+0=ch3c0+0 c2c4h8+0=ch3c0+0 c2c4h8+0=ch3c0+0 c2c4h8+0=ch3c0+0 c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722 c2c4h8+0=c4h722 c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h722+ c2c4h8+0=c4h72+	3 +ho2 h2 oh +h2o 3+h2o2 3+ch4 2h5 o+ch3 c2h4 3 h2 oh +h2o 2+ch4 y2o3+oh 2c4h8(+m)	0 0 110405400	5.00E+15 4.20E+12 3.48E+05 3.48E+05 3.48E+11 6.00E+06 1.92E+04 4.44E+00 2.17E+05 1.81E+05 3.25E+05 3.46E+17 4.20E+05 1.20E+11 2.20E+06 1.96E+00 4.07E+11 1.06E+85 -2 2.50E+13 0.272C0E+00	0.0 0.0 2.5 0.7 2.0 2.6 3.5 2.3 2.3 2.3 2.3 2.3 2.3 2.3 2.3
	Low pressure lim TROE centering: h2o co co ch4 c2h6 h2 c2h6 h2 c2h2 c2h4 ar	0.17500E+ 0.17500E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	00 0.11940E+02 00 0.13406E+04 0.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 2.000E+00 2.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 3.000E+00 7.000E=01	0.97698E+04 0.60000E+05	0.10140E+05
1505. 1506. 1507. 1508. 1509. 1511. 1512. 1513. 1514. 1515. 1516. 1517. 1518. 1519. 1520. 1521. 1522. 1523.	11 12 2 4 8 -a	3 +ho2 4h8+t2c4h8 4h8+t2c4h8 4h8+t2c4h8 h2 oh +h2o 3+h2o2 3+ch4 2h5 o+ch3 c2h4 3 h2 oh +h2o 2+ch4 y2o3+oh		5.00E+15 4.20E+12 4.33E+14 4.33E+14 4.33E+14 4.33E+14 4.33E+14 4.34E+05 3.44E+11 6.00E+06 1.92E+04 4.44E+00 2.17E+05 1.81E+05 3.25E+05 3.25E+05 3.26E+17 8.20E+01 2.20E+06 1.96E+00 4.07E+11	0.0 0.0 -0.8 -0.8 2.5 0.7 2.0 2.6 3.5 2.3 2.3 -1.1 2.5 0.7 2.0 3.5 0.7 2.0 3.5 0.7 2.0 0.7 2.0 0.7 2.0 0.7 0.7 0.7 0.0 0.0 0.0 0.7 0.7

1524. 1525. 1526.	c4h8-1=c4h713+h c3h5-a+ch3=c4h8- c2h3+c2h5(+M)=c4	-1 1h8-1(+M) nit: 0 15500E+1	57 -0 11790E+02	4.08E+18 7.16E+36 1.50E+13 0.89845E+04	-1.0 -7.2 0.0	97350.0 8632.5 0.0
	TROF contoring:	0 100000	00 0 227805+04	0.600000000	0 57	325+04
	b2	U.19000ET	2 0000-00	0.000005+03	0.372	52ET04
	11Z	Enhanced by	2.000E+00			
	nzo ab 4	Enhanced by	0.000E+00			
	CI14	Enhanced by	2.000E+00			
	co ²	Enhanced by	2 0005+00			
	c2h6	Enhanced by	3 0005+00			
	ar	Enhanced by	7 000E-01			
1527	c4h8-1+o2=c4h713	2:::::::::::::::::::::::::::::::::::::		1 40E+12	0 0	35000 0
1528.	c4h8-1+o2=c4h714	l+ho2		2.10E+13	0.0	52300.0
1529.	c4h8-1+ho2=c4h71	3+h2o2		6.40E+03	2.6	12400.0
1530.	c4h8-1+ho2=c4h71	4+h2o2		6.00E+11	0.0	17000.0
1531.	c4h8-1+oh=c4h713	3+h2o		3.00E+06	2.0	-1520.0
1532.	c4h8-1+oh=c4h714	l+h2o		2.67E+06	2.0	450.0
1533.	c4h8-1+oh=c4h712	2+h2o		1.10E+06	2.0	1450.0
1534.	c4h8-1+oh=c4h711	+h2o		2.20E+06	2.0	2780.0
1535.	c4h8-1+o=c3h6+ch	120		2.50E+12	0.0	0.0
1536.	c4h8-1+o=ch3cho+	-c2h4		1.25E+13	0.0	850.0
1537.	c4h8-1+o=c2h5+ch	13+co		1.62E+13	0.0	850.0
1538.	c4h8-1+o=c4h713+	-oh		8.80E+10	0.7	3250.0
1539.	c4h8-1+o=c4h714+	-oh		5.10E+13	0.0	7850.0
1540.	c4h8-1+o=c4h712+	oh		6.00E+10	0.7	7630.0
1541.	c4h8-1+o=c4h711+	oh		1.20E+11	0.7	8960.0
1542.	c4h8-1+h=c4h713+	-h2		3.02E+06	2.2	655.0
1543.	c4h8-1+h=c4h714+	-h2		3.00E+06	2.2	5629.0
1544.	c4h8-1+h=c4h712+	-h2		1.27E+07	2.0	7817.0
1545.	c4h8-1+h=c4h711+	-h2		1.98E+07	2.0	11363.0
1546.	c4h8-1+ch3=c4h71	.3+ch4		3.00E+00	3.4	4144.0
1547.	c4h8-1+ch3=c4h71	.4+ch4		1.44E+00	3.4	8560.0
1548.	c4h8-1+ch3=c4h/1	.2+ch4		8.0/E+00	3.3	9156.0
1549.	c4h8-1+ch3=c4h/1	1+ch4		5.03E+00	3.3	11581.0
1550.	c4h8-l+hco=c4h/l	3+ch2o		1.08E+0/	1.9	1/010.0
1551.	c4n8=1+c2n3=c4n7	13+0204		1.20E+11	0.0	5008.0
1552.	c4n8=1+c2n5=c4n/	13+CZI10		1.00E+11	0.0	12400.0
1554	$c_{4110} = 1 + c_{5113} = a - c_4$	11713+c3110		8.00E+10	0.0	12400.0
1555	c4h9-1+c3h5-t-c4	10713+0306		8 00E+10	0.0	12400.0
1556	c4h8-1+h=c3h6+ch	13		3 20E+22	-2 4	11180 0
1557.	c4h8-1+h=c2h4+c2	2h5		8.80E+16	-1.1	6461.0
1558	c4h714=c2h4+c2h3	}		2 00E+13	0 0	35500 0
1559.	c4h714=c4h6+h	, ,		3.16E+13	0.0	34780.0
1560.	c4h714+o2=c4h6+h	102		2.60E+11	0.0	4500.0
1561.	c4h714+ho2=c4h6+	-h2o2		1.80E+12	0.0	0.0
1562.	c4h714+ho2=>c3h5	-a+ch2o+oh		1.00E+12	0.0	0.0
1563.	c4h714+oh=c4h6+h	120		4.00E+13	0.0	0.0
1564.	c4h714+o=c4h6+oh	1		4.00E+13	0.0	0.0
1565.	c4h714+h=c4h6+h2	2		1.80E+12	0.0	0.0
1566.	c4h714+c2h3=c4h6	5+c2h4		4.00E+12	0.0	0.0
1567.	c4h714+c2h5=c4h6	5+c2h6		4.00E+12	0.0	0.0
1568.	c4h714+c2h5=c4h8	8-1+c2h4		5.00E+11	0.0	0.0
1569.	c4h714+c3h3=c4h6	5+c3h4-p		4.00E+12	0.0	0.0
1570.	c4h714+c3h3=c4h6	5+c3h4-a		4.00E+12	0.0	0.0
1571.	c4h714+c3h5-a=c4	lh6+c3h6		6.30E+12	0.0	0.0
1572.	c4h714+c4h714=c4	lh6+c4h8-1		3.16E+12	0.0	0.0

1573.	c4h714+c2h6=c4h8-1+c2h5			3.00E+13	0.0	12300.0
1574.	c4h714+c2h4=c4h8-1+c2h3			1.00E+11	0.0	15000.0
1575.	c4h714+c3h6=c4h8-1+c3h5	-a		1.00E+11	0.0	9800.0
1576.	c4h714+c4h8-1=c4h8-1+c4	h713		1.00E+11	0.0	8300.0
1577.	c4h714=c4h713			3.31E-03	4.4	23806.0
1578.	c4h714+h(+M)=c4h8-1(+M)			3.60E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit: 0.	30100E+	49 -0.93200E+0	1 0.58336E	+04	
	TROE centering: 0.	49800E+	00 0.13140E+0	0.13140E	+04 0.500	00E+05
	h2 Enhance	ed by	2.000E+00			
	h2o Enhance	ed by	6.000E+00			
	ch4 Enhance	ed by	2.000E+00			
	co Enhance	ed by	1.500E+00			
	co2 Enhance	ed by	2.000E+00			
	c2h6 Enhance	ed by	3.000E+00			
	ar Enhance	ed by	7.000E-01			
1579.	c4h714+h=ch3+c3h5-a			2.00E+21	-2.0	11000.0
1580.	C4h/14+hco=C4h8-1+co			6.00E+13	0.0	0.0
1581.	C4n/14+cn3=C4n6+cn4	-		1.10E+13	0.0	0.0
1582.	C4n6+C4n/14=nC4n5+C4n8-	1		6.32E+U2	3.1	20010.0
1583.	C4n6+C4n/14=1C4n5+C4n8-	1		6.32E+U2	3.1	18010.0
1584.	C4n/13=C4n6+n			1.20E+14	0.0	49300.0
1505.	C411/13=C411612+11			1.40E+13	0.0	15200.0
1507	c4h713+o2=c4h612+bo2			0.90ETII 1 00E+12	0.0	22730 0
1588	c4h713+bc2=c4h6+b2c2			1 00E+12	0.0	22/30.0
1589	c/h713+ho2=c2h3choch3+o2	h		2 93E+15	-0.7	3615 3
1590	$c/h^{71}3+h^{2}=c/h^{71}3$			2 798+37	-7 9	6497 9
1591	c4h713+ho2=c2h3coch3+h2	ō		3 10E+05	1.6	2677 6
1592	c4h713ooh=c2h3coch3+h2o	0		2 54E+28	-5.0	49919 4
1593.	c4h7l3ooh=c2h3choch3+oh			2.39E+36	-6.5	49429.4
1594.	c2h3choch3=c2h3+ch3cho			6.50E+29	-5.4	26645.0
1595.	c2h3choch3=c2h3coch3+h			1.76E+28	-4.9	22765.2
1596.	c2h3choch3=c2h4+ch3co			8.42E+25	-4.4	22382.6
1597.	c4h713+oh=c4h6+h2o			6.00E+12	0.0	0.0
1598.	c4h713+oh=c4h612+h2o			6.00E+12	0.0	0.0
1599.	c4h713+o=c4h6+oh			4.00E+13	0.0	0.0
1600.	c4h713+o=c2h3cho+ch3			6.03E+13	0.0	0.0
1601.	c4h713+h=c4h6+h2			1.80E+13	0.0	0.0
1602.	c4h713+h=c4h612+h2			1.80E+13	0.0	0.0
1603.	c4h714+h=c4h713+h			1.00E+13	0.0	0.0
1604.	c4h713+c2h3=c4h6+c2h4			1.00E+13	0.0	0.0
1605.	c4h713+c2h3=c4h612+c2h4			1.00E+13	0.0	0.0
1606.	c4h713+c2h5=c4h6+c2h6			4.00E+12	0.0	0.0
1607.	c4h713+c2h5=c4h8-1+c2h4			5.00E+11	0.0	0.0
1608.	c4h713+c3h3=c4h6+c3h4-p			4.00E+12	0.0	0.0
1609.	c4h713+c3h3=c4h6+c3h4-a			4.00E+12	0.0	0.0
1610.	c4h7l3+c3h5-a=c4h6+c3h6			6.30E+12	0.0	0.0
1611.	c4h7l3+c3h5-a=c4h8-l+c3	h4-a		1.00E+12	0.0	0.0
1612.	c4h/l3+c4h/l3=c4h6+c4h8	-1		3.00E+12	0.0	0.0
1613.	c4n/12=c3n4-a+cn3			2.00E+13	0.0	32500.0
1014.	C411/12=Dutyne+n			4.00E+12	0.0	38000.0
1616	C411/12 = C411012 + 11			3.UUE+13 4.60E+16	-1 4	1010 0
1617	$c_{11712} + c_{210} + c_{120} + c_$			4.00E+10 2 00E+13	-1.4	31500.0
1618	$c_{11}, 22 = c_{314} = p_{+}c_{113}$			2.00ETI3	0.0	40000.0
1619	c4h722=butyp2+b			4 NOE+12	0.0	36500.0
1620	$c_{11}, 22 = bucy_{11}, 11$ $c_{11}, 22 = bucy_{11}, 21$			9 03E+22	-3.2	4296 0
1621	c4h711=c2h2+c2h5			2.00E+13	0.0	33000.0

1622.	c4h711+o2=>hco+c2h5cho	4.60E+16	-1.4	1010.0						
1623	c4h711+ch20=c4h8-1+hc0	5 42E+03	28	5862 0	1674.	c4h6+ch3=ic4h5+ch4		1.00E+14	0.0	19800.0
1624	hut vne=c3h3+ch3	3 005+15	0.0	75800 0	1675.	c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4		5.00E+13	0.0	22800.0
1625	but unotho2-nc(h5+h2o2	5 0000+10	0.0	17000.0	1676	c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4		2 50E+13	0 0	19800 0
1023.		5.00E+11	0.0	17000.0	1677	$i c 3h7 + c 2h^2 = c 4h6 + c h 3$		2 775+10	0.0	6504 0
1626.	butyne+no2=1c4n5+n2o2	5.00E+11	0.0	1/000.0	1677			2.778110	0.0	0304.0
1627.	butyne+oh=nc4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200.0	10/8.	C416=C214+C212		7.00E+12	0.0	6/100.0
1628.	butyne+oh=ic4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200.0	16/9.	h2cc+c2h4=c4h6		1.00E+12	0.0	0.0
1629.	butyne+oh=ch2co+c2h5	4.00E-04	4.5	-1000.0	1680.	c4h6=c4h4+h2		2.50E+15	0.0	94700.0
1630.	butyne+o=c3h6+co	2.00E+13	0.0	1660.0	1681.	c4h6+h=c3h4-p+ch3		2.00E+12	0.0	7000.0
1631.	butvne+h=c3h4-a+ch3	1.30E+05	2.5	1000.0	1682.	c4h6+h=c3h4-a+ch3		2.00E+12	0.0	7000.0
1632.	but vne+h=c2h5+c2h2	6.50E+04	2.5	1000.0	1683.	c2h3cho+c2h3=c4h6+hco		2.80E+21	-2.4	14720.0
1633	hut vne+h=ic4h5+h2	6 50E+13	0 0	9400 0	1684.	c4h6+ho2=c4h6o25+oh		1.20E+12	0.0	14000.0
1624	but ync i heng (hE i h2	6 EOE 12	0.0	0400.0	1685	c/h6+ho2=c2h3choch2+oh		4 80F+12	0 0	14000 0
1004.		1.000114	0.0	10500.0	1696	alblachach2-alb6al2		2 005114	0.0	E0600.0
1635.	butyne+cn3=1C4n5+cn4	1.008+14	0.0	19500.0	1000.	C2II3CII0CII2=C4II6023		2.006+14	0.0	10400.0
1636.	butyne+ch3=nc4h5+ch4	1.00E+14	0.0	19500.0	1687.	C4n6023=sc3n5cn0		1.956+13	0.0	49400.0
1637.	butyne=c4h612	2.50E+13	0.0	65000.0	1688.	c4h6o23=c2h4+ch2co		5.75E+15	0.0	69300.0
1638.	butyn2=c4h6	3.00E+13	0.0	65000.0	1689.	c4h6o23=c2h2+c2h4o1,2		1.00E+16	0.0	75800.0
1639.	butyn2=c4h612	6.90E+13	0.0	64600.0	1690.	c4h6o25=c4h4o+h2		5.30E+12	0.0	48500.0
1640.	butyn2+h=c4h612+h	2.00E+13	0.0	4000.0	1691.	c4h4o=co+c3h4-p		1.78E+15	0.0	77500.0
1641.	butvn2+h=c4h5-2+h2	3.40E+05	2.5	2490.0	1692.	c4h4o=c2h2+ch2co		5.01E+14	0.0	77500.0
1642.	but vn2+h=c3h4-p+ch3	2.60E+05	2.5	1000.0	1693	c4h6+oh=hoc4h6		1 84E+12	0 0	-1170 0
16/3	$hut yn^2 = c/h^2 = -2+h$	3 80 8 + 15	0 0	89200 0	2000.	Declared duplicate reaction		1.012112	0.0	11/0.0
1644	but yn2+ch3-c(h5-2+ch)	1 405+14	0.0	19500.0	1.004	AbClab - backbo		E 700.10	0 0	E 7 0 0
1044.		I.40E+14	0.0	10500.0	1094.	C4n6+on=noC4n6		5./UE+12	0.0	-570.0
1645.	C4n5-2=1C4n5	5.00E+12	0.0	50500.0		Declared duplicate reaction				
1646.	1C4h5+h=C4h5-2+h	3.10E+26	-3.4	1/423.0	1695.	hoc4h6=>c2h3choch2+h		2.50E+14	0.0	28000.0
1647.	c4h5-2+ho2=oh+c2h2+ch3co	8.00E+11	0.0	0.0	1696.	hoc4h6=>c3h6+co+h		2.50E+14	0.0	28000.0
1648.	c3h3+ch3=c4h612	5.00E+12	0.0	0.0	1697.	hoc4h6=>c2h3coch3+h		1.50E+14	0.0	28000.0
1649.	c4h612=c4h6	2.50E+13	0.0	63000.0	1698.	hoc4h6=>ac3h5cho+h		1.50E+14	0.0	28000.0
1650.	c4h612+h=c3h4-a+ch3	2.00E+13	0.0	2000.0	1699.	c2h3choch2=>c3h6+co		2.00E+16	0.0	57000.0
1651.	c4h612+h=c3h4-p+ch3	2.00E+13	0.0	2000.0	1700	$c^{2}h^{3}choch^{2}=>c^{2}h^{4}+ch^{2}co$		5 00E+16	0 0	73000 0
1652.	c4h612=ic4h5+h	4.20E+15	0.0	92600.0	1701	$i_{c/h5+h=c/h/+h2}$		3 005+13	0.0	, 5000.0
1653	c4h612+b=c4h6+b	2 00E+13	0 0	4000 0	1701.	i a 4 h E i h = a 2 h 2 i a h 2		2 000112	0.0	2000 0
1654	c/h612+h=ic/h5+h2	1 708+05	2 5	2490.0	1702.			2.00E+13	0.0	2000.0
1004.		1.70E+0J	2.5	10500.0	1703.	1C4n5+on=C4n4+n20		4.008+12	0.0	0.0
1655.	C4n612+Cn3=1C4n5+Cn4	7.00E+13	0.0	18500.0	1704.	ic4h5+hco=c4h6+co		5.00E+12	0.0	0.0
1656.	C4nbl2+0=Cn2C0+C2n4	1.20E+08	1.6	327.0	1705.	ic4h5+ho2=c4h6+o2		6.00E+11	0.0	0.0
1657.	c4h612+o=ic4h5+oh	1.80E+11	0.7	5880.0	1706.	ic4h5+o2=c2h3co+ch2o		8.21E+15	-1.0	11110.0
1658.	c4h612+oh=ic4h5+h2o	3.10E+06	2.0	-298.0	1707.	ic4h5+o2=ch2cho+ch2co		1.80E+14	-0.8	14000.0
1659.	c2h3+c2h3=c4h6	1.50E+42	-8.8	12483.0	1708.	ic4h5+o2=c4h4+ho2		6.79E+07	1.3	13220.0
1660.	c2h3+c2h4=c4h6+h	5.00E+11	0.0	7310.0	1709.	ic4h5+o=>ch2co+c2h3		1.00E+13	0.0	2000.0
1661.	c4h6+h=nc4h5+h2	6.36E+06	2.4	15206.0	1710	ic4h5+ch2o=c4h6+hco		4 00E+12	0 0	8840 0
	Declared duplicate reaction				1710.	$i c 4b5 (\pm M) = c 4b 4 \pm b (\pm M)$		1 005+14	0.0	50000 0
1662.	c4h6+h=nc4h5+h2	2.02E+04	1.5	14540.0	1/11.	Lett processing limit. 0 2000EL16	0 0000000000000000000000000000000000000	1.000414	0.0	50000.0
	Declared duplicate reaction				1710	LOW pressure limit: 0.20000E+16	0.000005+00	1.000114	0 0	27000 0
1663	c/h6+h=ic/h5+h2	2 328+08	1 9	12885 0	1/12.	nc4h5(+M) = c4h4 + h(+M)		1.00E+14	0.0	37000.0
1664	c/h6+o-nc/h5+ob	2.52E100	1 0	2740 0		Low pressure limit: 0.10000E+15	0.00000E+00	0.30000E+05		
1004.		7.306+06	1.9	3740.0	1713.	nc4h5+m=c2h3+c2h2+m		3.99E+14	0.7	42330.0
1665.	c4h6+o=1c4h5+oh	7.50E+06	1.9	3/40.0	1714.	nc4h5+o=>c3h5-a+co		1.00E+13	0.0	2000.0
1666.	c4h6+o=c2h3chcho+h	1.20E+13	-0.0	1493.0	1715.	nc4h5+h=ic4h5+h		1.00E+14	0.0	0.0
1667.	c4h6+o=c3h4-a+ch2o	2.24E+11	0.7	2149.0	1716.	nc4h5+ch2o=c4h6+hco		4.00E+12	0.0	8840.0
1668.	c4h6+o=c2h3+ch2cho	2.46E+11	0.6	1220.0	1717	nc4h5+h=c4h4+h2		1 50E+13	0 0	0 0
1669.	c4h6+oh=nc4h5+h2o	1.53E+06	2.1	1905.5	1718	nc/h5+ob=c/h/h2o		2 005+12	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction				1710.	ng4hElbaang4h6laa		E 00E+12	0.0	0.0
1670.	c4h6+oh=nc4h5+h2o	3.49E+06	2.0	4292.0	1719.			J.00E+12	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction				1/20.	11C411J+110Z=CZ113+C11ZC0+01		0.005+12	0.0	0.0
1671	c4h6+oh=ic4h5+h2o	1 545+06	2 1	1440 6	1721.	nc4n5+no2=c4h6+o2		6.00E+11	0.0	0.0
	Declared duplicate reaction	1.010.00	2.1	1110.0	1722.	nc4h5+o2=c4h4+ho2		1.07E+11	0.2	9760.0
1670	albélab-jalbElbla	1 620100	2 0	2160 0	1723.	c2h6+nc4h5=c2h5+c4h6		6.00E+12	0.0	0.0
10/2.	C4HOTOH-IC4ND+NZO	T.ONR+OP	2.0	2130.0	1724.	c2h+c2h3=c4h4		1.00E+14	0.0	0.0
4 6 8 9	Declared duplicate reaction	0.004			1725.	c4h4=c2h2+c2h2		3.40E+13	0.0	77102.0
16/3.	C4n6+cn3=nC4h5+ch4	2.00E+14	0.0	22800.0	1726.	c4h4=c4h2+h2		1.30E+15	0.0	94680.0
					1727	c4h4=ic4h3+h		6.30E+13	0.0	87100 0
									· · ·	0,200.0

1728.	c4h4+o2=nc4h3+ho2	1.00E+13	0.0	63200.0
1729.	c4h4+o2=ic4h3+ho2	1.00E+13	0.0	44640.0
1730.	c4h4+ho2=nc4h3+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
1731.	c4h4+ho2=ic4h3+h2o2	1.00E+11	0.0	9920.0
1732.	c4h4+oh=ic4h3+h2o	1.00E+07	2.0	2000.0
1733.	c4h4+oh=nc4h3+h2o	7.50E+06	2.0	5000.0
1734.	c4h4+oh=c3h3+ch2o	5.00E+12	0.0	0.0
1735.	c4h4+h=ic4h3+h2	3.33E+05	2.5	9240.0
1736.	c4h4+h=nc4h3+h2	6.65E+05	2.5	12240.0
1737.	c4h4+oh=>co+c3h5-a	3.00E+13	0.0	0.0
1738.	c2h4+c2h=c4h4+h	1.20E+13	0.0	0.0
1739.	c4h4+c2h3=c6h6+h	1.90E+12	0.0	1250.0
1740.	c2h2+c2h2=ic4h3+h	1.13E+14	0.0	56000.0
1741.	ic4h3+o2=ch2co+hcco	1.00E+12	0.0	0.0
1742.	ic4h3+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0.0	0.0
1743	i c 4h 3 + o = h 2 c 4 o + h	2 00E+13	0 0	0 0
1744	ic4h3+b=c4h2+b2	1 02E+13	0 0	0.0
1745	i c (h3) (+M) = c (h2 + h) (+M)	1 00E+14	0.0	55000 0
1/40.	Low pressure limit: $0.25000\text{E}+16$ 0.0000E+00	0 480005+05	0.0	55000.0
1746	no(h2(+M)-c(h2+h(+M))	1 000110	0 0	36000 0
1/40.	IC4II3 (TM) - C4II2 TII (TM)	0.2000000000	0.0	30000.0
1 7 4 7	LOW pressure limit: 0.10000E+15 0.00000E+00	0.30000E+03	0 0	0.0
1747.	nc4n3+on=c4n2+n2o	5.00E+13	0.0	0.0
1/48.	nC4n3+n=C4n2+n2	5.00E+13	0.0	0.0
1749.	c2h2+c2h(+M)=nc4h3(+M)	8.30E+10	0.9	-363.0
	Low pressure limit: 0.12400E+32 -0.47180E+01	0.18710E+04		
	TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+03	0.56130E+04	0.13	387E+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			
1750.	c2h2+c2h(+M)=ic4h3(+M)	8.30E+10	0.9	-363.0
	Low pressure limit: 0.12400E+32 -0.47180E+01	0.18710E+04		
	TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+03	0.56130E+04	0.13	387E+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			
1751	h2c4o+ob=ch2co+bcco	1 00E+07	2 0	2000 0
1752	$h^2c^4o+b=c^2h^2+bcco$	5 00E+13	0 0	3000.0
1753	$c^{2}b^{2}+c^{2}b=c^{4}b^{2}+b$	1 9/F+13	0.0	-70 0
1754	$c/h^2+M=c/h+h+M$	3 508+17	0.2	80065 0
1766	c4ll2+M=C4ll+ll+M	5.50E+17	0.0	410.0
1756		1 205112	0.0	-410.0
1757.	C4IIZTU = C3IIZTCO	1.205+12	0.0	U.U
175/.	pc4n9on=c4n8-1+n20	3.2UE+U4	2.0	0.05130.0
1758.	n+pc4n8on-1=pc4n9on	4.UUE+13	0.0	0.0
1759.	h+pc4h8oh-2=pc4h9oh	4.00E+13	0.0	0.0
1/60.	n+pc4nvoh-3=pc4h9oh	4.00E+13	0.0	0.0
1761.	h+pc4h8oh-4=pc4h9oh	4.00E+13	0.0	0.0
1762.	pc4h9oh(+M)=pc4h9o+h(+M)	6.04E+14	0.1	103800.0
	Low pressure limit: 0.24080E+40 -0.70300E+01	0.95960E+05		

		0 4400000.10 0 6010000.10	
	TROE centering: 0.38650E+00 0.56491E+03	0.44380E+10 0.6/100E+10	
1/63.	pc4h9oh(+m)<=>ch3+proloh-3(+m)	3./9E+24 -2.2 880/	0.0
	Low pressure limit: 0.17820E+61 -0.12280E+02	0.83980E+05	
	TROE centering: 0.23520E+00 0.72400E+03	0.50000E+10 0.50000E+10	1
1764.	pc4h9oh(+m)<=>c2h5+pc2h4oh(+m)	5.53E+24 -2.2 8901	0.0
	Low pressure limit: 0.66320E+60 -0.12130E+02	0.84720E+05	
	TROE centering: 0.24380E+00 0.74406E+03	0.50000E+10 0.50000E+10)
1765.	pc4h9oh(+M) = ch2oh+nc3h7(+M)	3.02E+23 -1.9 8571	0.0
	Low pressure limit. 0 14160E+60 -0 11930E+02	0 83980E+05	
	TROE centering: 0 76460E+00 0 83440E+10	0 72480E+03 0 82140E+10)
1766	$p_{c4b} = p_{c4b} = p_{c$	6 33E+20 -1 4 9493	, 0 0
1,00.	Low processing limit: $0.69020E\pm52 = 0.10210E\pm02$	0.992005+05	0.0
	THE PRESSURE TIMIL. 0.09020E+02 -0.10210E+02	0.63469EL03 0.17960EL10	1
1707	IROE CENTERING: 0.70300E+00 0.98820E+10	2 000112 0 0 E224	,
1707.	pc4n9on+o2=no2+pc4n8on-4	3.00E+13 0.0 5234	0.0
1768.	pc4n90n+oz=noz+pc4n8on-3	2.00E+13 0.0 4980	0.0
1/69.	pc4n9on+oz=noz+pc4n8on-z	2.00E+13 0.0 4980	0.0
1770.	pc4h9oh+o2=ho2+pc4h8oh-1	2.00E+13 0.0 4680	0.0
1771.	pc4h9oh+o2=ho2+pc4h9o	1.00E+13 0.0 5634	0.0
1772.	pc4h9oh+h=pc4h8oh-1+h2	8.79E+04 2.7 291	5.0
1773.	pc4h9oh+h=pc4h8oh-2+h2	1.08E+05 2.7 444	0.0
1774.	pc4h9oh+h=pc4h8oh-3+h2	3.06E+04 2.8 347	3.3
	Declared duplicate reaction		
1775.	pc4h9oh+h=pc4h8oh-3+h2	5.73E+13 0.1 1056	8.9
	Declared duplicate reaction		
1776	pc4h9oh+h=pc4h8oh-4+h2	4 93E+05 2 5 673	5 9
1777	pc/hgoh+h=pc/hgo+h2	9 46E+02 3 1 870	1 0
1770	pc4h9oh+oh=pc4h9oh=1+h2o	4 56E+03 2 9 -369	6.0
1770.		4.50EF05 2.0 -500	1 0
1700	pc4n9on+on=pc4n8on-2+h2o	3.92E+U3 2.8 -206	1.2
1780.	pc4n9on+on=pc4n8on-3+n2o	7.05E+09 0.9 50	4./
1781.	pc4h9oh+oh=pc4h8oh-4+h2o	1.3/E+07 1.8 86	8.3
1782.	pc4h9oh+oh=pc4h9o+h2o	7.90E+06 1.6 -46	1.0
	Declared duplicate reaction		
1783.	pc4h9oh+oh=pc4h9o+h2o	1.60E+03 2.9 5	3.0
	Declared duplicate reaction		
1784.	pc4h9oh+o=pc4h8oh-1+oh	1.45E+05 2.5 87	6.0
1785.	pc4h9oh+o=pc4h8oh-2+oh	1.44E+04 2.6 302	9.0
1786.	pc4h9oh+o=pc4h8oh-3+oh	3.90E+13 0.0 520	0.0
1787.	pc4h9oh+o=pc4h8oh-4+oh	5.10E+13 0.0 785	0.0
1788.	pc4h9oh+o=pc4h9o+oh	1.46E-03 4.7 172	7.0
1789.	$p_{c4h9oh+ho2=p_{c4h8oh-1+h2o2}}$	2.80E-05 5.3 826	8.0
1790	$p_{c}^{4}h_{0}h_{b}^{2}=p_{c}^{4}h_{0}h_{c}^{2}+h_{0}^{2}h_{c}^{2}$	1 50E-02 4 5 1470	6 0
1791	pc4h9oh+ho2=pc4h8oh=3+h2o2	5 52E-04 4 8 1184	6.0
1702	pc4h9oh+bo2=pc4h9oh=4+b2o2	2 6/E-01 / 3 1726	5.0
1702.	pc4n50n+n02-pc4n50n-4+n202	2.04E-01 4.5 1/20 6.47E 07 5.2 1052	2.0
1704		0.4/E=0/ J.5 1055	3.0
1/94.		2.20E+02 3.1 /60	0.0
1795.	pc4h9oh+ch3=pc4h8oh-2+ch4	9.20E+02 2.9 879	0.0
1796.	pc4h9oh+ch3=pc4h8oh-3+ch4	2.00E+11 0.0 960	0.0
1797.	pc4h9oh+ch3=pc4h8oh-4+ch4	3.00E-01 4.0 820	0.0
1798.	pc4h9oh+ch3=pc4h9o+ch4	1.02E+00 3.6 822	1.0
1799.	pc4h8oh-4=pc4h8oh-3	3.79E+47 -12.4 2645	0.0
1800.	pc4h8oh-4=pc4h8oh-2	1.26E+38 -9.1 3532	0.0
1801.	pc4h8oh-4=pc4h8oh-1	8.16E+32 -7.0 2624	0.0
1802.	pc4h8oh-3=pc4h8oh-2	1.21E+62 -15.8 5394	0.0
1803.	pc4h8oh-3=pc4h8oh-1	2.05E+35 -8.0 3867	0.0
1804	pc4h8oh-3=pc4h9o	1.88E+07 0.0 1668	0.0
1805	pc4h8oh-2=pc4h8oh-1	1.54E+53 -13.3 4499	0.0
1806	pc4h8oh-2=pc4h9o	8 17E+06 0 0 2329	0 0
1807	pc/h8oh-1=pc/h9o	3 408+08 0.0 2027	0 0
TO01.	be meen t-beamoo	J. TOLINO U.U ZZ9/	0.0

1000		0 (77,11	~ ~	10000 0	10.00		1 055.10	1 0	1 5 0 0 0
1808.	pc4h9o=nc3h7+ch2o	2.6/E+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=butlen1ol+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=butlen1ol+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=but2en1o1+h	3.95E+53	-12.7	51400.0	1876.	nc3h7cho=>nc3h7+hco	6.00E+14	0.0	79100.0
1819	pc4b8ob-3=but3ep1o1+b	1 74E+52	-12 4	50630 0	1877.	nc3h7cho=pc2h4cho+ch3	1.00E+17	0.0	84650.0
1010.	pc4hboh = 4 = c2h4 + pc2h4 + b	1 748+50	_11 /	40710 0	1878	nc3h7cho=c2h5+ch2cho	1 58E+17	0 0	80280 0
1020.	pc4h8oh-4=but3op1o1+b	1 100-157	-14 0	40710.0	1879	nc3h7cho+o2=nc3h7co+ho2	3 00E+13	0 0	39150 0
1021.		4 200110	-14.0	1100 0	1880	nc3h7cho+o2=c3h6cho=2+ho2	4 00E+13	0.0	47690 0
1022.	pc4n90+02=nc3n/cn0+no2	4.28E+10	0.0	1100.0	1000.	nc3h7cho+o2=c3h6cho=3+ho2	4.00E+13	0.0	47690.0
1823.	pc4n8on-1+o2=nc3n7cno+no2	1.506+18	-1.8	1120.0	1001.	nconvenoroz-contento ornoz	4.000113	0.0	50070 0
1824.	pc4h8oh-1+o2=butlen1o1+ho2	8.90E+03	2.1	4/0.0	1002.	nc3h7cho+b=nc2h7co+b2	4.00ETI3	1.2	2405 0
1825.	pc4h8oh-2+o2=butlen1o1+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	1003.		4.102+09	1.2	2405.0
1826.	pc4h8oh-2+o2=but2en1o1+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	1884.	nc3n/cno+n=c3n6cno-2+n2	1.30E+06	2.4	44/1.0
1827.	pc4h8oh-3+o2=but2en1o1+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	1885.	nc3n/cno+n=c3n6cno-3+n2	1.30E+06	2.4	44/1.0
1828.	pc4h8oh-3+o2=but3en1o1+ho2	6.90E+11	0.0	5000.0	1886.	nc3h/cho+h=c3h6cho-4+h2	9.50E+04	2.8	6280.0
1829.	pc4h8oh-4+o2=but3en1o1+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	1887.	nc3h/cho+o=nc3h/co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
1830.	butlen1ol+h=butlen1ol3+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0	1888.	nc3h7cho+o=c3h6cho-2+oh	4.77E+04	2.7	2106.0
1831.	butlenlol+oh=butlenlol3+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0	1889.	nc3h7cho+o=c3h6cho-3+oh	4.77E+04	2.7	2106.0
1832.	butlen1ol+ho2=butlen1ol3+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0	1890.	nc3h7cho+o=c3h6cho-4+oh	9.50E+04	2.7	3716.0
1833.	butlen1ol+ch3=butlen1ol3+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0	1891.	nc3h7cho+oh=nc3h7co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
1834.	but2en1o1+h=but1en1o13+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0	1892.	nc3h7cho+oh=c3h6cho-2+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
1835	but2en1ol+oh=but1en1ol3+h2o	3 00E+06	2 0	-1520 0	1893.	nc3h7cho+oh=c3h6cho-3+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
1836	but 2en1o1+bo2=but 1en1o13+b2o2	6 40E+03	2 6	12400 0	1894.	nc3h7cho+oh=c3h6cho-4+h2o	5.25E+09	1.0	1590.0
1837	but 2en1o1+ch3=but 1en1o13+ch4	1 005+11	2.0	7300.0	1895.	nc3h7cho+ho2=nc3h7co+h2o2	3.10E+12	0.0	11920.0
1030	but 2 cn 1 c 1 + but 2 cn 1 c 1 4 + b 2	1 748+04	2.5	2510.0	1896.	nc3h7cho+ho2=c3h6cho-2+h2o2	5.60E+12	0.0	17690.0
1020.		2.0000.00	2.5	2010.0	1897.	nc3h7cho+ho2=c3h6cho-3+h2o2	5.60E+12	0.0	17690.0
1040	butzenioi+on=butzenioi4+hzo	3.00E+06	2.0	-298.0	1898	nc3h7cho+ho2=c3h6cho-4+h2o2	8 50E+12	0 0	20440 0
1840.	but2en101+no2=but2en1014+n202	9.60E+03	2.6	13900.0	1899	nc3h7cho+ch3=nc3h7co+ch4	1 70E+12	0.0	8440 0
1841.	but2en101+cn3=but2en1014+cn4	2.22E+00	3.5	5670.0	1900	nc3h7cho+ch3=c3h6cho-2+ch4	2 70E+04	23	7287 0
1842.	but3en1o1+h=but2en1o14+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0	1900.	ng3h7cho+ch3=c3h6cho=3+ch4	2 705+04	2.3	7207.0
1843.	but3en1o1+oh=but2en1o14+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0	1901.	nc3h7cho+ch3=c3h6cho=4+ch4	4 508-03	2.5	7154 0
1844.	but3en1o1+ho2=but2en1o14+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0	1902.	ne2h7cho+bao=na2h7co+ch2o	1 7001 03	0.0	9110 0
1845.	but3en1ol+ch3=but2en1ol4+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0	1903.	nc3h7cho+ch2o=nc3h7co+ch2oh	1 155111	0.0	1200 0
1846.	butlenlol=>nc3h7cho	9.66E+23	-3.3	59987.5	1904.		1.15E+11	0.0	1280.0
1847.	butlen1ol3+ho2=ch3cho+c2h2oh+oh	4.50E+12	0.0	0.0	1905.	ncsn/cno+cnso=csn6cno-2+cnson	1.10E+11	0.0	5000.0
1848.	but2en1o14+ho2=c2h3cho+ch2oh+oh	4.50E+12	0.0	0.0	1906.	nc3n/cno+cn3o=c3n6cno-3+cn3on	1.10E+11	0.0	5000.0
1849.	but2en1o14=c4h6+oh	7.40E+12	0.0	27350.0	1907.	nc3h/cho+ch3o=c3h6cho-4+ch3oh	1.58E+11	0.0	/000.0
1850.	butlen1ol+oh=c2h5cho+ch2oh	1.37E+12	0.0	-1040.0	1908.	nc3h7cho+ch3o2=nc3h7co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
1851.	but2en1o1+oh=ch3cho+pc2h4oh	1.37E+12	0.0	-1040.0	1909.	nc3h7cho+c2h5=nc3h7co+c2h6	1.70E+12	0.0	8440.0
1852.	but3en1o1+oh=ch2o+pro1oh-3	1.37E+12	0.0	-1040.0	1910.	nc3h7cho+c2h3=nc3h7co+c2h4	1.70E+12	0.0	8440.0
1853.	$sc4h9oh+h\leq=>sc4h9o+h2$	5.55E-23	10.6	-4459.0	1911.	nc3h7co=c2h5chco+h	4.66E+10	0.8	42550.0
1854	$sc4h9oh+oh\leq=>sc4h9o+h2o$	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=nc3h7+co+m	8.64E+15	0.0	14400.0
1856	sc/hgoh+bo2 = >sc/hgo+b2o2	2 50F+12	0.0	24000 0	1914.	c3h6cho-4+o2=c3h6cho-4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
1050.	3041130111102 (-> 3041130+11202	2.045100	2.6	7722 0	1915.	c3h6cho-4o2+ho2=but4ooh1*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
1050	ac4h9ah haa/=>ac4h9a ah9a	2.046700	3.0	12500 0	1916.	c3h6cho-4o2+h2o2=but4ooh1*o+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0
1050.	SC4H90HTHCON=>SC4H90+CH20	3.40E+04	2.5	13300.0	1917.	c3h6cho-4o2+ho2=>c3h6cho-4o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
1000	SC4N9ON+CN3O<=>SC4N9O+CN3ON	2.30E+10	0.0	2900.0	1918.	c3h6cho-4o2+ch3o2=>c3h6cho-4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
1860.	sc4nyon+cn3o2<=>sc4nyo+cn3o2n	1.50E+12	0.0	15000.0	1919.	c3h6cho-4o=ch2o+pc2h4cho	2.00E+13	0.0	20000.0
1861.	sc4nyon+c2n5<=>sc4hyo+c2h6	1.00E+11	0.0	9200.0	1920.	c3h6cho-4o+o2=choc2h4cho+ho2	8.43E+09	0.0	220.0
1862.	sc4h9oh+o=sc4h8oh-l+oh	1.93E+05	2.7	3716.0	1921	$c_{3h6cho-3+o2=c_{3h6cho-3o2}}$	9.00E+18	-2.5	0.0
1863.	sc4h9oh+o=sc4h8oh-3+oh	4.77E+04	2.7	2106.0	1922.	$c_{3h6cho} = 302 + h_{0}2 = b_{1} \pm 300h_{0} \pm 0.02$	2 29E+11	0.0	-1790 0
1864.	sc4h9oh+h=sc4h8oh-1+h2	1.88E+05	2.8	6280.0	1000	$c_{3h6ch0} = 3c_{2+h02} = but 3c_{0+h1} + bc_{2}$	2.200111 2 A1F+10	0.0	9036 N
1865.	sc4h9oh+h=sc4h8oh-3+h2	1.30E+06	2.4	4471.0	1923.	CONTRACTOR DOZ + 11202 - DUCOUULT OF1102	2.410712	0.0	.0.02

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.	c4h8looh2j+o2=butlooh2o2	1.20E+12	0.0	0.0
1929.	c3h6cho-2o2+ho2=but2ooh1*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0	1981.	c4h8looh3j+o2=butlooh3o2	1.20E+12	0.0	0.0
1930.	c3h6cho-2o2+h2o2=but2ooh1*o+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0	1982.	c4h8looh4j+o2=butlooh4o2	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.	butlooh2o2=>butlooh2*o+oh	1.25E+06	2.1	35600.0
1935.	c4h8-1+oh=sc4h8oh-1	5.00E+53	-12.2	22976.0	1987.	butlooh2o2=>but2ooh1*o+oh	7.08E+08	1.2	26800.0
	Declared duplicate reaction				1988.	butlooh3o2=>but4ooh2*o+oh	1.25E+06	2.1	35600.0
1936.	c4h8-1+oh=sc4h8oh-1	4.28E+41	-9.3	8921.0	1989.	butlooh3o2=>but3ooh1*o+oh	8.52E+06	1.4	15900.0
	Declared duplicate reaction				1990.	butlooh4o2=>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.	butlooh4o2=>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
1941.	sc4h8oh-1+o2=sc4h8oh-1oo	1.50E+18	-2.5	0.0		Declared duplicate reaction			
1942.	sc4h8oh-3+o2=sc4h8oh-3oo	9.50E+18	-2.5	0.0	1996.	but2ooh4o2=>but3ooh1*o+oh	1.84E+05	2.4	36500.0
1943.	pc4h8oh-2oo=c2h5cho+ch2o+oh	1.00E+09	0.0	30.0	1997.	but2ooh4o2=>but4ooh2*o+oh	2.69E+07	1.1	14100.0
1944.	sc4h8oh-loo=c2h5cho+ch2o+oh	1.00E+09	0.0	30.0	1998.	but2ooh1*o=>c2h5cho+hco+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
1945.	sc4h8oh-3oo=ch3cho+ch3cho+oh	1.00E+09	0.0	30.0	1999.	but3ooh1*o=>ch3cho+ch2cho+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
1946.	sc4h8oh-1=ch3cho+c2h5	1.52E+12	0.6	31120.0	2000.	but4ooh1*o=>ch2o+pc2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
1947.	sc4h8oh-1+o2=c2h5coch3+ho2	2.25E+11	0.0	2500.0	2001.	butlooh2*o=>c2h5co+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
1948.	sc4h8oh-3=ch3+c2h5cho	1.52E+12	0.6	31120.0	2002.	but3ooh2*o=>ch3co+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
1949.	sc4h8oh-3+o2=c2h5coch3+ho2	2.25E+11	0.0	2500.0	2003.	but4ooh2*o=>ch2o+ch3coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
1950.	nc4h10+c4h91o2=pc4h9+c4h91o2h	1.68E+13	0.0	20440.0	2004.	but4ooh2*o=>ch3cooh+ch3cho	2.10E+08	0.0	24500.0
1951.	nc4h10+c4h91o2=sc4h9+c4h91o2h	1.12E+13	0.0	17690.0	2005.	but3ooh1*o=>ch3coch3+hcooh	2.10E+08	0.0	23000.0
1952.	nc4h10+c4h92o2=pc4h9+c4h92o2h	1.68E+13	0.0	20440.0	2006.	but3ooh1*o=>ch3cooh+ch3cho	2.10E+08	0.0	24500.0
1953.	nc4h10+c4h92o2=sc4h9+c4h92o2h	1.12E+13	0.0	17690.0	2007.	c4h8looh2i=c4h8cv1o2+oh	3.30E+10	0.5	14600.0
1954.	pc4h9+o2=c4h91o2	2.54E+55	-13.3	16300.0	2008.	c4h8looh3j=c4h8cylo3+oh	1.20E+10	0.3	17700.0
1955.	sc4h9+o2=c4h92o2	2.01E+31	-6.0	5209.0	2009.	c4h8looh4j=c4h8cylo4+oh	2.26E+09	0.3	11000.0
1956.	c2h5o2+ch3o2=>c2h5oh+ch2o+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2010.	c4h82ooh1j=c4h8cy1o2+oh	1.24E+11	0.5	14500.0
1957.	c2h5o2+ch3o2=>ch3cho+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2011.	c4h82ooh3j=c4h8cy2o3+oh	3.30E+10	0.5	14600.0
1958.	c4h9lo2+ch3o2=>pc4h9oh+ch2o+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2012.	c4h82ooh4j=c4h8cy1o3+oh	3.05E+10	0.3	20200.0
1959.	c4h9lo2+ch3o2=>nc3h7cho+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2013.	c4h8cylo2+h=>h2+c3h6cho-2	9.60E+08	1.5	2785.0
1960.	c4h92o2+ch3o2=>sc4h9oh+ch2o+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2014.	c4h8cy1o2+h=>h2+c2h5+ch2co	9.60E+08	1.5	2785.0
1961.	c4h92o2+ch3o2=>c2h5coch3+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2015.	c4h8cylo2+h=>h2+c2h5coch2	4.80E+08	1.5	2005.0
1962.	c4h9lo2+c4h9lo2=>pc4h9oh+nc3h7cho+o2	5.00E+10	0.0	0.0	2016.	c4h8cy1o3+h=>h2+c3h6cho-3	9.60E+08	1.5	2785.0
1963.	c4h9lo2+c4h92o2=>pc4h9oh+c2h5coch3+o2	5.00E+10	0.0	0.0	2017.	c4h8cy1o3+h=>h2+acetoch2	4.80E+08	1.5	2005.0
1964.	c4h9lo2+c4h92o2=>nc3h7cho+sc4h9oh+o2	5.00E+10	0.0	0.0	2018.	c4h8cy1o4+h=>h2+c3h6cho-4	1.92E+09	1.5	2005.0
1965.	c4h92o2+c4h92o2=>sc4h9oh+c2h5coch3+o2	5.00E+10	0.0	0.0	2019.	c4h8cy2o3+h=>h2+ch3chcoch3	4.80E+08	1.5	2005.0
1966.	butlooh2o2+ch3o2=>but2ooh1*o+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2020.	c4h8cy1o2+oh=>h2o+c3h6cho-2	4.80E+06	2.0	-1192.0
1967.	butlooh3o2+ch3o2=>but3ooh1*o+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2021.	c4h8cylo2+oh=>h2o+c2h5+ch2co	4.80E+06	2.0	-1192.0
1968.	butlooh4o2+ch3o2=>but4ooh1*o+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2022.	c4h8cy1o2+oh=>h2o+c2h5coch2	2.40E+06	2.0	-1192.0
1969.	but2ooh1o2+ch3o2=>but1ooh2*o+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2023.	c4h8cy1o3+oh=>h2o+c3h6cho-3	4.80E+06	2.0	-1192.0
1970.	but2ooh3o2+ch3o2=>but3ooh2*o+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2024.	c4h8cy1o3+oh=>h2o+acetoch2	2.40E+06	2.0	-1192.0
1971.	but2ooh4o2+ch3o2=>but4ooh2*o+ch3oh+o2	1.34E+11	0.0	0.0	2025.	c4h8cy1o4+oh=>h2o+c3h6cho-4	9.60E+06	2.0	-1192.0
1972.	c4h9lo2=nc3h7cho+oh	1.84E+05	2.4	36500.0	2026.	c4h8cy2o3+oh=>h2o+ch3chcoch3	2.40E+06	2.0	-1192.0
1973.	c4h91o2=c4h81ooh2j	1.92E+07	1.5	28600.0	2027.	c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c3h6cho-2	8.00E+12	0.0	14400.0
1974.	c4h91o2=c4h81ooh3j	9.34E+07	1.1	18600.0	2028.	c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c2h5+ch2co	8.00E+12	0.0	14400.0
1975.	c4h91o2=c4h81ooh4j	1.46E+06	1.4	20500.0	2029.	c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c2h5coch2	4.00E+12	0.0	13260.0

0000	41.0.1.2.1.0.21.0.21.0.21.0.1.2	0.005.10	0.0	14400 0
2030.	C4n8Cy103+n02=>n202+C3n6Cn0-3	8.UUE+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	$c/h8cv^2 a^3 + ha^2 = b^2 a^2 + ch^3 ch coch^3$	4 00F+12	0 0	13260 0
2000.		1 505,12	0.0	10200.0
2034.	C418Cy102=nC31/Ch0	1.596+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
2030	c/h92o2=c2c/h9±bo2	3 405+10	0.7	30700 0
2039.		J.40E+10	0.7	30700.0
2040.	C4n9202=t2C4n8+n02	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.	but.3ooh1*o=>c4a1d3oxo+h+oh	2.50E+14	0.0	43000.0
2044	$hut 4 \circ h1 * \circ = > ch \circ c^{2}h 4 ch \circ + h + \circ h$	2 50E+14	0 0	43000 0
2011.	butloch2to=>chold2ovolblob	2.500111	0.0	12000.0
2045.		2.306+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	$hut 4 \circ h1 * \circ + \circ h = > ch \circ c^{2}h4 ch \circ + \circ h + h^{2} \circ$	3 62E+12	0 0	-380 0
2050.	but look 2 to lok > cho chi loo chi hi cho	2 620112	0.0	200.0
2051.		3.02ETI2	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+ho2=c4h91o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
2055.	c4h91o2+h2o2=c4h91o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0
2056	$c_{4h}91o_{2+ch}^{2}c_{2}=c_{4h}^{4}91o_{2h+hco}^{2}$	1 99E+12	0 0	11660 0
2057	$a/b \theta 1 a 2 + a b 3 a b a - a 4 b \theta 1 a 2 b + a b 3 a a$	1 000+12	0.0	11660 0
2037.		1.006+12	0.0	11000.0
2058.	c4h91o2+ho2=>pc4h9o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1800.0
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.	c4h9lo2h=pc4h9o+oh	2.50E+15	0.0	43000.0
2062	c4h92o2+ho2=c4h92o2h+o2	2 29E+11	0 0	-1790 0
2002.	a4b02o2+b2o2=a4b02o2b+bo2	2.200111	0.0	1,00.0
2003.		2.416712	0.0	11000.0
2064.	C4n92o2+cn2o=c4n92o2n+nco	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
2005.	alh02o2h=aalh0alah	2.500115	0.0	42000 0
2070.		2.JUE+1J	0.0	43000.0
2071.	sc4n90=c2n5cocn3+n	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	c4h81ooh3i=>c3h6+ch2o+oh	1 23E+09	13	24900 0
2076	albelachdi=>a2b4+a2b4a2b	2 220112	1.0 0 6	20000.0
2070.		2.336+12	0.0	29000.0
2077.	c4n82oon4j=>c2n4+cn3cno+on	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.	c4h8looh2j=>c3h5o+ch3+oh	1.09E+09	1.4	29500.0
2081.	c4h82ooh3i=>ch3chcho+ch3+oh	2.78E+11	0.7	32500.0
2082	c/h91o2+pc/h9=pc/h9o+pc/h9o	7 00F+12	0 0	-1000 0
2002.	a/b01o2+co/b0-co/b0+co/b0c	7 000112	0.0	_1000.0
2003.	41.00.0141.041.0.141.0	7.006712	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.	c4h9lo2+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	$c^{4h713+o2=c^{4h71o2}}$	6 00E+09	0.0	-2300.0
2094	c4h73o2=c4h6+ho2	5 13E+09	1 0	28400 0
2095	$c^{4h73o2} = c^{4h63ooh4i}$	8 62E+08	1 0	35500.0
2096	c4h71o2=c4h61ooh4i	1 48E+08	1 0	21000 0
2090.	c4h63och4i+o2=c4h63och4o2	1 50E+18	-2 5	0.0
2007.	c4h61ooh4j+o2=c4h61ooh4o2	1 20E+10	0.0	-2300 0
2000.	c4h63oob4o2=>c4h54o2b3*o+ob	2 975-09	1 0	25500.0
2099.	c4h61cch4c2=>c4h54c2h1*c+ch	2.07E+00	1.0	25500.0
2100.	$c411010011402 - 2c4113402111^{-}0+011$	9.07ETU7	1.0	2000.0
2101.		2.50ETIS	0.0	43000.0
2102.	$C4n5402n1^0 = >Cn20+C2n2+nc0+0n$	2.50E+15	1.0	43000.0
2103.		1.70E+09	1.0	26400.0
2104.	c4n/102=cn3cncn0+cn20	1.70E+09	1.0	26400.0
2105.	cn3cocn3+cn3o=cn3cocn2+cn3on	1.00E+11	0.0	7000.0
0100	Reverse Arrnenius coefficients:	1.00E+10	0.0	9000.0
2106.	tc3h6cho=1c3h5cho+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
2120.	Reverse Arrhenius coefficients:	1 815+13	0.0	, , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,
2121	ic3b7co=ic3b7+co	1 /3E+13	-0.0	10950 0
2121.	Reverse Arrhenius coefficients:	1 50E+11	0.0	1810 0
2122	ic3h7cho+oh=ic3h6cho+h2o	3 1200711	2 0	-298 0
2122.	Powerse Arrhonius coefficients:	5.12E+00 6 30E+05	2.0	19130 0
2122	ic3h7cho+ho2=ic3h6cho+h2o2	0.59ETUS 2 7/EJ0/	2.0	15500.0
2123.	Powerse Arrhonius coefficients:	2.745+04	2.0	T000.0
2124	reverse Armenius Coefficients:	3.338+04	2.2	3400.U
2124.	LCSHOCHU+02=1CSHSCHO+H02	2.725-19	0.0	17210.0
0105	Reverse Arrhenius COEFIICIENTS:	1.39E+11	-0.2	1/310.0
2125.	tc3n6cn0+02=ch3coch3+co+oh	3.62E-20	0.0	0.0

	Warningall RH	EV parameters a	re zero 0.000	E+00 0.00 0.	000E+00	
	this :	reaction will b	e treated as irr	eversible		
2126.	tc3h6cho+ho2=ic3	3h7cho+o2		3.68E+12	0.0	1310.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	1.24E+14	-0.2	43350.0
2127.	tc3h6cho+ch3=ic3	3h5cho+ch4		3.01E+12	-0.3	-131.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	2.21E+15	-0.8	67900.0
2128.	ic3h5cho+oh=ic3h	15co+h2o		6.13E+04	2.6	-4586.4
2129.	ic3h5cho+ho2=ic3	3h5co+h2o2		1.18E-04	4.9	3684.3
2130.	ic3h5cho+ch3=ic3	3h5co+ch4		3.98E+12	0.0	8700.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	1.52E+13	0.0	25570.0
2131.	ic3h5cho+o=ic3h5	ico+oh		7.18E+12	0.0	1389.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	4.61E+11	0.0	15680.0
2132.	ic3h5cho+o2=ic3h	15co+ho2		2.00E+13	0.0	40700.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	5.31E+10	0.3	-394.0
2133.	ic3h5cho+h=ic3h5	ico+h2		2.60E+12	0.0	2600.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	3.80E+11	0.0	18990.0
2134.	ic3h5co=c3h5-t+c	0		4.78E+12	0.0	27470.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	1.51E+11	0.0	4809.0
2135.	ic3h7+oh=c3h6+h2	20		2.41E+13	0.0	0.0
	Reverse Arrheniu	us coefficients	:	2.98E+12	0.6	83820.0
2136.	c2h5coch3+h=c2h5	i+ch3cho		3.55E+12	-0.1	7920.7
2137.	c2h5coch3+h=c2h5	icho+ch3		9.98E+10	0.3	9474.7
2138.	c2h5coch3(+m)<=>	⊳c2h5+ch3co(+m)		3.56E+27	-3.2	85748.1
	Low pressure lin	nit: 0.25780E+	80 -0.17020E+02	0.96875E+05		
	TROE centering:	0.20000E-	03 0.91070E+03	0.22707E+05	0.5635	55E+04
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	со	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 lin	nit: 0.11750E+	73 -0.15361E+02	0.90947E+05		
	TROE centering:	0.76000E-	01 0.70200E+03	0.74415E+05	0.5069	98E+04
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6 000E+00			
	C0	Enhanced by	1 500E+00			
	co2	Enhanced by	2 000E+00			
	ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	c2h6	Enhanced by	3.000E+00			
2140	$c^{2}b^{5}c^{2}b^{3}(\pm m) \leq = 2$	ch3coch2+ch3(+m		2 248+24	-2 5	87646 2
2140.	Low pressure lir	nit. 0 44170E+	70 -0 14656E+02	0 94756E+05	2.5	0/040.2
	TROE centering.	0 12440E+	00 0 10579E+04	0.10430E+07	0 6112	9E+04
	ho centering.	Enhanced by	2 00000-00	0.104301107	0.0112	10104
	h2o	Enhanced by	2.000E+00			
	1120	Enhanced by	1 5008+00			
	CO	Enhanced by	1.300E+00			
	cuz ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	-2h6	Enhanced by	2.000E+00			
21.41	c2ll0	blachEasab2(im)	3.0006+00	2 055116	0.2	07570 1
2141.	CZIISCOCIIS (+m) <=>		0 450500.01	3.U3E+10	-0.3	9/5/9.1
	Low pressure III	LLC: 0.46/50E+	52 -0.45850E+01	0.83405E+05	0 1005	47.04
	TRUE Centering:	U.66330E+	00 0.150285+06	0.320006+01	0.1005	4出十04
	11Z	Ennancea by	2.UUUE+UU			
	n∠o	Ennanced by	6.UUUE+UU			
	со	Ennanced by	1.5UUE+UU			
	COZ	Ennanced by	2.000E+00			
	CD4	Ennanced 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	0 1 4 0	0.5.5.0.4
	TROE centering: 0.50000E+00 0.12000E+01	0.12000E+01	0.142	85E+04
	h2o Enhanced by 6.000E+00			
	co Enhanced by 1.500E+00			
	co2 Enhanced by 2.000E+00			
	ch4 Enhanced by 2.000E+00			
	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	0.107	30E+04
	h2 Enhanced by 2.000E+00			
	co Enhanced by 0.000E+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.L
2155.	$c_{2n5}c_{0n5}+c_{n5}<=>c_{2n5}c_{0n5}+c_{n4}$	2.04E+01	3.4	9356.1
2150.	$c_{213}c_{0c13+0} = ace_{0c12+01}$	9.81E+U5	2.4	4/50.0
2158	$c^{2h5}coch^{3+o} = c^{2h5}coch^{2+oh}$	1.44ETII 5.00E+12	0.2	2970.0
2159	$c^{2h5coch3+o^{2}=>acetoch2+bo^{2}}$	3 00E+13	0.0	52290 0
2160.	$c^{2h5coch3+o2} < > dccccch3+ho2$	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.	$c_{2n5}c_{3n5}c_{2n5}$	5.UUE+10	0.0	1401.0
21/4.	acetocn2+o2<=>no2+c2n3cocn3	2.638+00	3.0	1481.2
21/3.	Declared duplicate reaction	J.00E-07	4.4	4221.3
2176	$ch3chcoch3+o2\leq>c2h3coch3+bo2$	1 50E-02	4 0	13140 8
21/0.	Declared duplicate reaction	1.000 02	1.0	10110.0
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.	acetoch2<=>c2h5	coch2		3.35E+33	-7.1	34478.
2182.	acetoch2<=>ch3+	ch3chco		6.44E+11	-0.1	43433.
2183.	acetoch2<=>c2h5	+ch2co		1.21E+29	-5.4	46577.
2184.	h+acetoch2<=>c2	h5+ch3co		1.47E+35	-5.8	20746.
2185.	h+acetoch2<=>c2	h5co+ch3		9.35E+33	-5.5	20860.
2186.	h+acetoch2<=>ch	3coch2+ch3		8.13E+32	-5.2	20915
2187	ch3chcoch3+ho2<	=>ch3chococh3+oł		4 41E+28	-4.6	11770
2107.	ab 2 ab ap ab 2 l b a 2 <	=>ch3ch0c0ch3+01	1	1 520110	1.0	0257
2100.		->CII3COCOCII3+II20		1.536719	-2.2	53000
2189.	ch3chcoch3<=>ch	3+Ch3ChCo		1.526+31	-5.2	53980.
2190.	ch3chcoch3<=>h+	c2h3coch3		1.6/E+29	-4.8	53356.
2191.	ch3chcoch3<=>c2	h5coch2		1.22E+48	-10.9	67143.
2192.	ch3chcoch3<=>c2	h4+ch3co		8.42E+39	-7.9	59709.
2193.	ch3chcoch3<=>c2	h5+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<=>c2h	5+ch2co		1.70E+29	-4.8	42920
2198.	c2h5coch2<=>ch3	+ch3chco		6.92E+48	-10.6	74370
2199	$c^{2h5coch2 <=>c^{2h}}$	4+ch3co		6 32E+42	-9.0	52442
2200	c2h5coch2<=>h+c	2h3coch3		1 35E+35	-7 1	57179
2200.	b+c2b5coch2<->c	2h5+ch3co		2 245+30	-6.9	25024
2201.	h + c2h E co ch2<=>c	2hEcoloh2		2.246+39	-0.9	20024.
2202.	h + - 2h E = = = h 2 < - > =	21130070113		3.24ET44	-0.3	30920.
2203.	n+c2n5cocn2<=>c	nscocnz+cns		1.765+35	-5.7	23742.
2204.	c2n5cocn2+no2<=	>c2n5cocn2o+on		1.666+29	-4.6	12875.
2205.	acetoch2+o2=ace	toch2o2		9.00E+18	-2.5	0
2206.	acetoch2o2+ho2=	but4ooh2*o+o2		2.29E+11	0.0	-1790.
2207.	acetoch2o2+h2o2	=but4ooh2*o+ho2		2.41E+12	0.0	9936
2208.	acetoch2o2+ho2=	>acetoch2o+oh+o2	2	1.40E+16	-1.6	1860
2209.	acetoch2o2+ch3o	2=>acetoch2o+ch3	30+02	1.40E+16	-1.6	1860
2210.	acetoch2o=ch2o+	ch3coch2		2.00E+13	0.0	20000.
2211.	acetoch2o+o2=c4	ald3oxo+ho2		8.43E+09	0.0	220
2212.	c2h5coch2+o2=c2	h5coch2o2		9.00E+18	-2.5	0
2213.	c2h5coch2o2+ho2	=butlooh2*o+o2		2.29E+11	0.0	-1790.
2214.	c2h5coch2o2+h2o	2=butlooh2*o+ho2	2	2.41E+12	0.0	9936
2215	c2h5coch2o2+ho2	=>c2h5coch2o+oh-	- +o2	1 40E+16	-1 6	1860
2216	c2h5coch2o2+ch3	$o^2 = c^2 h^5 c o c h^2 o + c$	- b2 - b30+02	1 40E+16	-1 6	1860
2210.	c2h5coch2o<=>c2	b5co+ch2o	51100102	1 14E+13	0 1	1125
2217.	c2h5coch2o(->c2	Apld2orrotho2		0 432100	0.1	220
2210.	c2115c0c1120+02=c	4410208071102		0.43ETU9	0.0	220
2219.	ch3chcoch3+oz=c	43002^0		1.00E+19	-2.5	1700
2220.	C43002*0+no2=bu	t300n2*0+02		2.29E+11	0.0	-1/90.
2221.	c43002*0+h202=b	ut3ooh2*o+ho2		2.41E+12	0.0	9936
2222.	c43oo2*o+ho2=>c	h3chococh3+oh+o2	2	1.40E+16	-1.6	1860
2223.	c43oo2*o+ch3o2=	>ch3chococh3+ch3	30+02	1.40E+16	-1.6	1860
2224.	ch3chococh3=ch3	cho+ch3co		2.00E+13	0.0	20000.
2225.	c2h3coch3(+m)<=	>ch3co+c2h3(+m)		2.58E+22	-1.7	92775.
	Low pressure li	mit: 0.43080E+	64 -0.12945E+02	0.10164E+	06	
	TROE centering:	0.24820E+	00 0.57015E+04	0.36000E+	02 0.10	539E+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			
	ch/	Enhanced by	2.000001000			
	c2h6	Enhanced by	3 0005+00			
2226	c2110		5.000ET00	0 775100	1 0	04070
2220.	CZIISCOCIIS(+M)<=	-CZIISCO+CIIS(+M)	74 0 152010:00	9.//L+20	-1.2	84070.
	Low pressure 11	.mitt: 0.23380E+	14 -U.IJJZIE+UZ	0.93/008+	00 0 00	2100.04
	TRUE centering:	U.31/30E+	00 0.926/UE+03	U.395UUE+	·∪∠ U.66	51015+04
	n∠	Enhanced by	∠.UUUE+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			

2227.	c2h3coch3(+m)<=>c2h3coch2+h(+m) 3. Low pressure limit: 0.31600E+40 -0.66860E+01 0.	.52E+18 .93378E+0	-0.9)5	99383.8
	TROE centering: 0.34720E+00 0.70000E+00 0.4 h2 Enhanced by 2.000E+00 0.4 h2o Enhanced by 6.000E+00 0.4 co Enhanced by 1.500E+00 0.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 0.500E+00	.20800E+0	02 0.1392	0E+03
	cn4 Enhanced by 2.000E+00			
2220	c2h6 Enhanced by 3.000E+00	60117	1 /	6275 0
2228.	$c_{2n3}c_{2n3}c_{n3}c_$	00E+17	-1.4	5962 0
2230	$c^{2}h^{3}coch^{3}+b=c^{2}h^{3}coch^{2}+b^{2}$	20E+07	2.2	6937 8
2231.	c2h3coch3+oh=c2h3coch2+h2o	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=ch3co+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+()5	
	TROE centering: 0.50500E-01 0.80870E+03 0.	.40299E+0	04 0.6198	3E+04
	h2 Enhanced by 2.000E+00			
	nzo Enhanced by 6.000E+00			
	co Enhanced by 1.500E+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
	Warningall REV parameters are zero 0.000E+	00.00	0.000E+00	
	this reaction will be treated as irreve	ersible		
2242.	ic3h6co+o=ch3coch3+co 3	.20E+12	0.0	-437.0
	Warningall REV parameters are zero 0.000E+0	0 0.00	0.000E+00	
2242	this reaction will be treated as irreve	rsible	0.0	1010 0
2243.	Warning all DEV parameters are sere 0 000EU	./3E+12	0.0	-1010.0
	this reaction will be treated as irrev	ou u.uu	0.0005+00	
2244.	c2h5chco+h=sc3h5co+h2	02E+06	2.2	655.0
2245.	c2h5chco+oh=sc3h5co+h2o	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
	Warningall REV parameters are zero 0.000E+	00.00	0.000E+00	
	this reaction will be treated as irreve	ersible		
2249.	c2h5chco+h=nc3h7+co 4	.40E+12	0.0	1459.0
	Warningall REV parameters are zero 0.000E+	00 0.00	0.000E+00	
0050	this reaction will be treated as irreve	ersible	0.0	407 0
2250.	c2n5chco+o=c3h6+co2 3	.20E+12	0.0	-43/.0
	warningall KEV parameters are zero 0.000E+0	v v.vv	U.UUUE+00	
2251	ch3chocho=ch3cho+hco	98E+13	0 0	9700 0
	Reverse Arrhenius coefficients: 4.	.34E+05	1.7	8282.0

2252.	sc3h5cho+ho2=sc3h5co+h2o2	1.00E+12	0.0	11920.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.07E+13	-0.3	17890.0
2253.	sc3h5cho+o=sc3h5co+oh	7.18E+12	0.0	1389.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.31E+12	0.0	21570.0
2254.	sc3h5cho+o2=sc3h5co+ho2	4.00E+13	0.0	37600.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.01E+11	0.3	2394.0
2255.	sc3h5cho+oh=sc3h5co+h2o	1.07E+13	0.0	-348.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.92E+13	0.0	37080.0
2256.	sc3h5co=c3h5-s+co	8.60E+15	0.0	23000.0
	Reverse Arrhenius coefficients.	1 00E+11	0.0	6000.0
2257	sc3h5cho=c3h6+co	3 90E+14	0.0	69000 0
2258	sc3h5cho+b=sc3h5co+h2	1 005+05	2 5	2490 0
2250.	se3h5chotch3=se3h5cotch4	1 105+00	2.5	5675 0
2255.	sc3h5chotc2h3=sc3h5cotc2h4	1 115+00	3.5	1682 0
2200.	2266666 2=22656666616	1.11E100	0.6	4002.0
2201.	Contende Arrhenius coefficients.	6.43ETIJ 5.00E+12	-0.0	1200.0
2262	Reverse Armenius coerricients:	J.UUE+12	0.0	1200.0
2202.	$c_{3h6ch0-3-sc_{3h5ch0+b}}$	1.306712	_0.0	31300.0
2203.	Demonson Auchoration coefficients	4.93E112	-0.1	2000.0
2264	alberto-3-alberto	9 25F+12	_0.0	2900.0
2204.	$c_{2}b_{c}b_{c} = c_{2}b_{1}c_{1}b_{2}c_{2}b_{3}c_{2}b_{3}c_{3}b$	0.2JEII2 2.00E112	-0.2	21300.0
2205.	ctcoct+ch=ctcoctp+h2c	2.00E+13 1 05F+10	1 0	1596 0
2200.	Bewaraa Arrhaniya coofficienta.	1 100-00	1.0	21020.0
2267	Reverse Armenius coefficients:	1.195709	0.9	21030.0
2207.	Percention-eccoecstil20	1.09ETIZ	0.0	-220.0
2260	Reverse Armenius coefficients:	3.30E+13	-0.5	28740.0
2200.	Percenting_etcoetp+nzoz	4./02+04	2.5	10490.0
2260	Reverse Armenius coefficients:	5.20E+04	2.2	44/2.0
2209.	eccoec+noz=eccoecs+nzoz	4.00E+11	0.0	6698.0
2270	Reverse Arrnenius coefficients:	4.63E+13	-0.7	6200.0 E1210.0
2270.	elcoel+oz=elcoelp+noz	4.10E+13	0.0	1000 0
0071	Reverse Arrnenius coefficients:	1.95E+10 2.10E+12	0.3	-1882.0
22/1.	eccoec+oz=eccoecs+noz	3.10E+13	0.0	41970.0
0070	Reverse Armenius coefficients:	2.54E+12	0.0	-1702.0
2212.	etcoet+n=etcoetp+n2	1.83E+07	2.0	11000.0
0070	Reverse Arrnenius coefficients:	4./9E+U5	2.0	11990.0
22/3.	etcoet+n=etcoets+n2	8.96E+06	2.0	3200.0
0074	Reverse Armenius coefficients:	4.04E+07	1./	1/010.0
22/4.	elcoel+c2ns=elcoelp+c2n4	1.00E+12	0.0	14040.0
0075	Reverse Arrnenius coefficients:	3.85E+U8	0.8	14040.0
22/5.	etcoet+c2n3=etcoets+c2n4	6.UUE+11	0.0	5600.0
0076	Reverse Armenius coefficients:	3.98E+IU	0.5	10/00.0
2276.	etcoet+c2n5=etcoetp+c2n6	1.00E+11	0.0	13400.0
0077	Reverse Arrnenius coefficients:	1.0/E+13	-0.6	14000.0
2211.	etcoet+c2n5=etcoets+c2n6	6.UUE+IU	0.0	8600.0
0070	Reverse Arrnenius coefficients:	1.10E+15	-0.9	18/20.0
22/8.	etcoet+cn3o=etcoetp+cn3on	4.34E+11	0.0	6460.0
0070	Reverse Arrnenius coefficients:	5.48E+U9	0.0	9020.0
2279.	etcoet+ch3o=etcoets+ch3oh	2.90E+11	0.0	2//1.0
0000	Reverse Arrnenius coefficients:	6.3UE+11	-0.3	14850.0
2280.	etcoet+cn3o2=etcoetp+cn3o2n	6.UZE+12	0.0	19380.0
0001	Reverse Arrnenius coefficients:	1.66E+13	-0.5	6642.0
2281.	elcoet+cn3o2=etcoets+ch3o2h	4.UUE+12	0.0	12020.0
0000	Reverse Arrnenius coefficients:	1.90E+15	-0.8	12030.0
2282.	elcoels=etcoc2n3+n	8./UE+16	-0.8	42130.0
2202	Reverse Arrnenius coefficients:	1.30E+13	0.0	100.0
2283.	eccoetp=c2n5co+c2n4	1.55E+17	-1.5	2/840.0
0004	Reverse Arrnenius coefficients:	/.UUE+10	0.0	9600.0
2284.	etcoczn3+oh=c2h5coch2+ch2o	1.00E+10	0.0	0.0

	Reverse Arrhenius coefficients:		1.67E+11	-0.4	18220.0
2285.	etcoc2h3+oh=petcoc2h3+h2o		7.55E+09	1.0	1586.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		1.28E+08	2.5	20210.0
2286.	etcoc2h3+oh=setcoc2h3+h2o		8.45E+11	0.0	-228.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		1.35E+13	-0.2	28600.0
2287.	etcoc2h3+ho2=c2h5co+ch2cho+oh		6.03E+09	0.0	7949.0
	Reverse Arrhenius coefficients		1 00E+00	0.0	0.0
2288	etcoc2h3+ho2=petcoc2h3+h2o2		2.38E+04	2.5	16490.0
2200.	Bowerse Arrhonius coefficients:		2.0001	3 0	3652 0
2280	otcoc2b3tbc2=sotcoc2b3tb2c2		2.405103	0.0	9698 0
2209.	Percenta Arrhaning coefficientes		2.00EIII 1.00EII2	0.0	0090.0
2200	Reverse Armenius coefficients:		1.90E+13	-0.5	17050.0
2290.	eccoc2n3+cn3o2=c2n5c0+cn2cn0+cn3o		3.9/E+11	0.0	1/050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		1.00E+00	0.0	0.0
2291.	etcoc2h3+ch3o2=petcoc2h3+ch3o2h		3.01E+12	0.0	19380.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		1.25E+12	1.1	5822.0
2292.	etcoc2h3+ch3o2=setcoc2h3+ch3o2h		2.00E+12	0.0	15250.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		7.79E+14	-0.7	11900.0
2293.	setcoc2h3=ch3chco+c2h3		1.64E+16	-0.7	54590.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		8.00E+10	0.0	12600.0
2294.	ac3h5cho=c3h5-a+hco		1.81E+19	-1.1	68480.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		1.00E+13	0.0	0.0
2295.	ac3h5cho+oh=ac3h5co+h2o		3.37E+12	0.0	616.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		2.18E+12	0.0	32150.0
2296.	ac3h5cho+oh=c2h3chcho+h2o		3.12E+06	2.0	-298.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		1.25E+08	1.8	34930.0
2297.	ac3h5cho+ho2=ac3h5co+h2o2		3.00E+12	0.0	11920.0
	Reverse Arrhenius coefficients:		1.15E+13	-0.3	11990.0
2298	ac3h5cho+ho2=c2h3chcho+h2o2		9 63E+03	2 6	13910 0
2230.	Beverse Arrhenius coefficients:		2.28E+06	2.1	17670.0
2299	$ac_{3}b_{5}cbo+cb_{3}o_{2}=ac_{3}b_{5}co+cb_{3}o_{2}b_{5}cb$		1 005+12	0 0	11920 0
2255.	Reverse Arrhenius coefficients:		1 58F+13	-0.5	11270 0
2300	aghter and a second and a secon		1 005112	0.0	17050 0
2300.	Bewerze Arrhenius coefficients		1.04E+15	0.0	20000.0
0201	Reverse Armenius coefficients:		1.94ETIJ	-0.7	20090.0
2301.	aconoco=cono-a+co		0.20E+15	-1.1	-330.0
0000	Reverse Armenius coefficients:		1.50E+11	0.0	4810.0
2302.	c2n3cncno=c3n5-s+co		1.00E+11	0.0	25000.0
2303.	c2h3chcho+h=ac3h5cho		1.00E+14	0.0	0.0
2304.	butyne+oh=ch3chcch+h2o		1.00E+07	2.0	2000.0
2305.	c4h6l2+oh=ch3ccch2+h2o		1.00E+07	2.0	2000.0
2306.	c4h6l2+oh=ch3chcch+h2o		2.00E+07	2.0	2500.0
2307.	c4h612+h=ch3ccch2+h2		1.50E+07	2.0	6000.0
2308.	c4h612+h=ch3chcch+h2		3.00E+07	2.0	6500.0
2309.	ch3chcch+h=ch3+c3h3		1.00E+14	0.0	0.0
2310.	ic4h5+h=ch3ccch2+h		3.00E+13	0.0	0.0
2311.	ch3ccch2+h=ch3+c3h3		1.00E+14	0.0	0.0
2312.	ch3ccch2+o2=ch3co+ch2co		4.16E+10	0.0	2510.0
2313.	ch3ccch2+h=h2cccch2+h2		1.00E+14	0.0	8000.0
2314.	ch3ccch2+oh=h2cccch2+h2o		1.00E+13	0.0	0.0
2315.	ch3ccch2(+M)=h2cccch2+h(+M)		1.00E+13	0.0	56000.0
	Low pressure limit: 0.20000E+15	0.00000E+00	0.48000E+05	5	
2316.	h2cccch2+oh=ic4h3+h2o		2.00E+07	2.0	2000.0
2317.	h2cccch2+h=ic4h3+h2		3.00E+07	2.0	6000.0
2318.	ic4h9+h=ic4h10		1.00E+14	0.0	0.0
2319	tc4h9+h=ic4h10		1.00E+14	0.0	0.0
232.0	ic4h9+h=ic4h8+h2		9.04E+11	0.0	0.0
2321	ic4h9=tc4h9		3.56E+10	0.9	34600 0
2322	ic4h9+o2=ic4h8+bo2		1.07E+00	3.7	9322 0
2322.	$t_{c4h9+o2=ic4h8+ho2}$		8 37F-01	36	11960 0
2020.	00110,02 10110,1102		0.0,1 UI	0.0	TT200.0

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.	$t_c4h9+oh=ic4h8+h2o$	1.80E+13	0.0	0.0
2329	$t_{c}4h_{9+h=i}c_{4h}8+h_{2}$	5 40E+12	0 0	0 0
2330	$t_{c}(h) + c_{i}(h) + c_{h}(h)$	4 16F+14	0.0	0.0
2330.		1.040.14	0.0	0.0
2331.		1.04E+14	0.0	0.0
2332.	tc4n9+cn3=1c4n8+cn4	1.26E+13	0.0	-596.0
2333.	1c4h9o2+c3h6=1c4h9o2h+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
2000.	Peverse Arrhenius coefficients:	2 16F+11	0 1	11510 0
2227	ic/b/oc/o2=ic2b7oboc/bo2	1 020111	0.1	1660 0
2337.		1.936711	0.0	1000.0
	Reverse Arrnenius coefficients:	1.88E+09	0.4	32620.0
2338.	1c4h9o2h=1c4h9o+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
2011.	Peverse Arrhenius coefficients:	2 50E+10	0.0	10100 0
2242	ialbaalabaalabaalabaalaa	1 400116	1 6	1000.0
2342.		1.405+10	-1.0	1000.0
2343.	1C4N902+1C4N902=>02+1C4N90+1C4N90	1.408+10	-1.0	1860.0
2344.	1c4h9o2+ho2=>1c4h9o+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
2345.	1c4h9o2+ch3=1c4h9o+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
2010.	Peverse Arrhenius coefficients:	1 185+11	0.4	14950 0
23/0	ic/bbo2tic/b7-ic/b8otic/b7o	7 000+12	0.4	-1000 0
2349.	December 2000 - 1041130 - 1041170	1.07E+12	0.0	14740.0
	Reverse Armenius coefficients:	1.2/8+11	0.4	14/40.0
2350.	1c4h9+ho2=1c4h9o+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	ic/blotob-ic3b7cbotb2o	1 910113	0.2	0.0
2004.	Development and the second sec	4.010+10	0.0	102000.0
	Reverse Arrnenius coefficients:	4.21E+13	0.1	103600.0
2355.	1c4n9o+ch3=1c3h/cho+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 976985+0/	1	
	10. pressure finite. 0.12/001/05 0.119401/02	5.57050 <u>H</u> 10-	-	

	TROE centering: h2o	0.17500E+ Enhanced by	00 0.13406E+04 6.000E+00	0.60000E+	05 0.10	140E+05
	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			
	er.	Enhanced by	7 000F-01			
250	ar iadh9-iadh7th	Ennanced by	7.000E-01	2 128176	17 2	122620 0
	ic4h0=ic4h7m/h			Z.IJE+70	-17.5	140000 0
				C 00E+41	-10.1	140000.0
.301.	104118+11=104119			0.20E+41	-8.9	14637.0
362.	ic4h8+h=ic4h9	ate reaction		1.46E+25	-4.3	5247.8
	Declared duplic	ate reaction				
2363.	ic4h8+h=tc4h9			5.30E+56	-13.1	20667.0
	Declared duplica	ate reaction				
364.	ic4h8+h=tc4h9			6.11E+26	-4.4	5182.3
	Declared duplic	ato reaction				
365	ic/h8+c2=hc2+ic/	ate reaction		3 128+13	0 0	37450 0
366	ic4h0+o2=ho2+ic4	1117 1b7		2 005+13	0.0	62270 0
	104110+02-1102+104	±11 / V		2.006+13	0.0	02270.0
367.	1C4n8+o=on+1C4n	/		1.05E+12	0.7	5884.0
368.	1C4h8+o=oh+1C4h	/v		1.206+11	0.7	8959.1
369.	ic4h8+h=h2+ic4h	/		7.29E+05	2.5	4361.2
2370.	ic4h8+h=h2+ic4h7	7v		8.62E+02	3.2	12167.0
2371.	ic4h8+oh=h2o+ic4	1h7		4.40E+04	2.7	-827.1
2372.	ic4h8+oh=h2o+ic4	1h7v		1.09E+04	2.8	1114.2
2373.	ic4h8+ho2=h2o2+i	Lc4h7		2.92E-01	4.1	12802.0
2374.	ic4h8+ho2=h2o2+i	Lc4h7v		9.70E+04	2.5	24733.2
2375.	ic4h8+ch3=ch4+ic	c4h7		3.00E+11	0.0	7300.0
376.	ic4h8+ch3=ch4+ic	c4h7v		2.00E+12	0.0	15000.0
377.	ic4h8+ch3o=ch3oh	n+ic4h7		1.68E+11	0.0	2600.0
378.	ic4h8+ch3o2=ch3c	2h+ic4h7		1.54E - 01	4.4	13547.0
379	ic4h8+c3h5-t=ic4	4h7+c3h6		7 94E+11	0 0	20500 0
280	ic4h8+c3h5-a=ic4	1h7+c3h6		7 94E+11	0.0	20500.0
281	ic/h8+c3h5-s=ic/	1h7+c3h6		7 94E+11	0.0	20500.0
202.	ic/h7-ic/h7w	117 (00110		9 70E+49	_11 7	73700.0
	ic4h9+o=ic2h7+h			7.45E+40	-11.7	102.0
	104110+0-10311/+110			7.4JE+00	1.9	103.0
2004.	1C4n8+0=>Cn2C0+C	203+003		3.05E+06	1.9	183.0
385.	1C4n8+0=>1C3n6CC	o+n+n		3.05E+06	1.9	183.0
386.	1c4h8+h=ch3+c3h6			3.08E+22	-2.6	12898.0
	Declared duplica	ate reaction				
387.	ic4h8+h=ch3+c3h6	5		4.13E+04	2.5	3679.1
	Declared duplication	ate reaction				
2388.	ic4h8+oh=pro1oh1	Ld+ch3		9.64E+18	-1.7	13107.0
2389.	ic4h8+oh=pro2oh1	Ld+ch3		3.86E+19	-1.7	13107.0
390.	ic4h8+oh=ic4h8oh	1		7.58E+53	-12.2	22976.0
	Declared duplica	ate reaction				
391.	ic4h8+oh=ic4h8oh	ı		6.41E+41	-9.3	8921.0
	Declared duplic	ate reaction.				
2392.	ic4h8+oh=tc4h8oh	1		2.53E+53	-12.2	22976.0
	Declared duplic	ate reaction				
393	ic4h8+oh=tc4b8ob	1		2.14E+41	-93	8921 0
	Doglarod duplin	· ato reaction			2.5	0721.0
394	ic4h8oh+o2=ic4h8	ale reaction		5 36E+89	-24 8	22402 0
2921.	ic/h8oh+o2=ch3cc	ch3+ch2o+oh		1 805+39	_8 1	15131 0
292	ic/h8ohto2=ic/h6	Sto2hio		2 7301700	_5 7	27242 0
	104110	021110		2.100729	-3.7	21243.0

2397.	ic4h8to2hio=ch3coch3+ch2o+oh	2.95E+33	-6.8	18685.0
2398.	ic4h7v+o2=ch3coch3+hco	3.10E+31	-5.9	5748.4
2399.	ic4h7v+o2=tc3h6cho+o	5.38E+18	-2.1	5142.9
2400.	ic4h7v+o2=ic3h5cho+oh	2.70E+19	-2.1	5142.9
2401.	ic4h7v=c3h4-p+ch3	4.00E+13	0.0	35500.0
2402.	ic4h7v+h=c3h4-a+ch4	3.33E+12	0.0	0.0
2403.	ic4h7v+h=c3h4-p+ch4	3.34E+12	0.0	0.0
2404.	ic4h7v+o=c3h6+hco	6.00E+13	0.0	0.0
2405.	ic4h7v+oh=>c3h6+hco+h	5.00E+12	0.0	0.0
2406	ic4h7v+ho2=>c3h6+hco+oh	2 00E+13	0 0	0 0
2407	ic4h7v+hco=ic4h8+co	9 00E+13	0 0	0 0
2408	ic4h7v+ch3=c3h4-n+c2h6	1 00E+11	0.0	0.0
2409	c3h4-a+ch3=ic4h7	4 02E+04	2.5	8847 5
2410	ic/h7+ho2=ic/h7o+oh	2 032115	-0.7	3615 3
2410.	ic4h7+h02=ic4h7oob	2.555415	-7.9	6407 0
2411.	ic4h7+hc2=ic2h5chc+h2c	2.795107	-7.9	2677 6
2412.	ic4h7aab=ic2bEaba4b2a	3.IUETUJ 2.E4EL20	1.0	2077.0
2413.	i e 4h 7 e e h = i e 4h 7 e l e h	2.345720	-3.0	49919.4
2414.	1C4N/00N=1C4N/0+0N	2.395+36	-6.5	49429.0
2415.	104170=0315-0+0120	6.50E+29	-5.4	20045.0
2416.	1C4n/0=1C3n50Cn2	2.428+28	-5.2	19691.2
2417.	1C4n/0=1C3n6Cn0	3.48E+42	-9.9	25297.9
2418.	1C4h/o=1C3h5cho+h	1./6E+28	-4.9	22/65.2
2419.	1c4h/o=c3h6+hco	8.42E+25	-4.4	22382.6
2420.	1c3h5och2=c3h5-t+ch2o	9./2E+33	-6.5	33002.5
2421.	1c3h5och2=1c3h6cho	3.9/E+34	-7.4	28116.9
2422.	1c3h5och2=1c3h5cho+h	2.1/E+34	-6.6	30647.6
2423.	1c3h5och2=c3h6+hco	9.72E+37	-8.0	32394.6
2424.	1c3h6cho=c3h5-t+ch2o	5.52E+40	-9.2	50508.7
2425.	ic3h6cho=ic3h5cho+h	2.86E+32	-6.3	39990.7
2426.	1c3h6cho=c3h6+hco	9.76E+27	-4.6	28923.9
2427.	c3h5-t+ch2o=1c3h5cho+h	1.35E+09	0.9	5173.0
2428.	c3h5-t+ch2o=c3h6+hco	3.45E+13	-0.7	6944.3
2429.	ic4h7+o=ic3h5cho+h	6.03E+13	0.0	0.0
2430.	1C4h8+ho2=1C4h8o+oh	1.4/E+09	0.8	14808.0
2431.	1c4h8o+oh=>1c3h6cho+h2o	1.25E+12	0.0	0.0
2432.	1c4h8o+h=>1c3h6cho+h2	1.25E+12	0.0	0.0
2433.	ic4h8o+ho2=>ic3h6cho+h2o2	2.50E+12	0.0	15000.0
2434.	ic4h8o+ch3o2=>ic3h6cho+ch3o2h	2.50E+12	0.0	19000.0
2435.	ic4h8o+ch3=>ic3h6cho+ch4	5.00E+10	0.0	10000.0
2436.	ic4h8o+o=>ic3h6cho+oh	1.25E+12	0.0	0.0
2437.	ic4h8+ho2=ic4h8to2h	1.64E+04	2.4	8300.0
2438.	ic4h8+ho2=tc4h8io2h	7.96E+06	0.8	8771.0
2439.	tc4h8io2h=>ic4h8o+oh	4.00E+11	0.0	22000.0
2440.	ic4h8io2h=>oh+ch2o+c3h6	8.45E+15	-0.7	29170.0
2441.	ic4h9+o2=ic4h9o2	6.70E+13	-0.3	-187.2
2442.	tc4h9+o2=tc4h9o2	6.70E+13	-0.3	-187.2
2443.	ic4h9o2=ic4h8+ho2	1.94E+08	1.3	29600.0
2444.	ic4h9o2=tc4h8io2h	1.67E+09	1.0	29500.0
2445.	ic4h9o2=ic4h8io2h	1.53E+08	1.0	28000.0
2446.	tc4h8io2h+o2=o2tc4h8io2h	2.50E+19	-2.5	0.0
2447.	ic4h8io2h+o2=o2ic4h8io2h	1.50E+18	-2.5	0.0
2448.	o2tc4h8io2h=ho2tc4h7io+oh	3.34E+09	1.0	30500.0
2449.	o2ic4h8io2h=ho2ic4h7io+oh	5.75E+08	1.0	20000.0
2450.	ho2tc4h7io=>hco+ch3coch3+oh	1.00E+16	0.0	42000.0
2451.	ho2ic4h7io=>ch2o+ch3chcho+oh	1.00E+16	0.0	42000.0
2452.	ic4h7oh=ic4h7o+h	5.97E+16	-0.6	105900.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.00E+13	0.0	0.0
2453.	ic4h8oh=ic4h7oh+h	3.71E+14	-0.4	40790.0

2454.	Reverse Arrhenius coefficients: ic4h7o+h2=ic4h7oh+h	1.00E+13 9.05E+06	0.0 2.0	1200.0 17830.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.16E+05	2.4	16310.0
2455.	ic4h7oh=ic4h7+oh	7.31E+16	-0.4	79700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.00E+13	0.0	0.0
2456.	ic4h8o=ic3h7cho	4.18E+13	0.0	52720.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.39E+10	0.6	72050.0
2457.	ic3h6cho=c2h3cho+ch3	2.42E+13	-0.3	22470.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	7800.0
2458.	ic4h7+o2=ic3h5cho+oh	2.47E+13	-0.5	23020.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.62E+14	-0.8	73390.0
2459	ic4h7+o2=ch3coch2+ch2o	7 14E+15	-1.2	21050 0
2100.	Reverse Arrhenius coefficients.	1 23E+15	-1 2	90190 0
2460	ic4b7o+o2=ic3b5cbo+bo2	3 00E+10	0.0	1649 0
2400.	Reverse Arrhonius coofficients:	6 31E+10	_0.0	38080 0
2461	ic/h7otho2=ic3h5choth2o2	3 00E+11	0.0	0.0
2401.	Deverse Arrhenius seefficients.	0 02E+14	0.0	79500 0
2462	ichhalch2=ic2h5cholch4	0.95ET14 2 40E+12	-0.0	/0300.0
2402.	December Jurbanius coefficients	2.40ETI3	0.0	0.0
2462	Reverse Arrhenius Coefficients:	7.20E+10	-0.5	95290.0
2403.	1C4n/O+O=1C3n3CnO+On	0.00E+12	0.0	0.0
0464	Reverse Arrnenius coefficients:	3.05E+14	-0.5	92720.0
2464.	1C4n/0+0n=1C3n5cn0+n20	1.81E+13	0.0	0.0
0.4.6.5	Reverse Arrhenius coefficients:	9.08E+15	-0.5	110000.0
2465.	1c4h/o+h=1c3h5cho+h2	1.99E+13	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.30E+15	-0.5	94810.0
2466.	1c4h8o=1c3h7+hco	6.00E+13	0.0	57200.0
2467.	1C4h8+o=1C4h8o	1.00E+08	1.3	-1079.0
2468.	1c4h8+c2h3=1c4h7+c2h4	1.00E+13	0.0	13000.0
2469.	c6h5+h(+M)=c6h6(+M)	9.79E+13	0.1	0.0
	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02	0.70000E+04		
	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00	0.70000E+04 0.58490E+03	0.61	130E+04
	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00	0.70000E+04 0.58490E+03	0.61	130E+04
	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h20 Enhanced by 6.000E+00	0.70000E+04 0.58490E+03	0.61	130E+04
	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h20 Enhanced by 6.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00	0.70000E+04 0.58490E+03	0.61	130E+04
	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h20 Enhanced by 6.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00	0.70000E+04 0.58490E+03	0.61	130E+04
	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h20 Enhanced by 6.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00	0.70000E+04 0.58490E+03	0.61	130E+04
2470.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h20 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 c6h6+h=c6h7c	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02	0.61	130E+04 4599.0
2470. 2471.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 c6h6+h=c6h7c c6h7c+o2=c6h6+ho2	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10	0.61 1.6 0.0	4599.0 0.0
2470. 2471. 2472.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h20 Enhanced by 6.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 c6h6+h=c6h7c c6h7c+o2=c6h6+ho2 c6h7c+ho2=c6h6+h2o2	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12	0.61 1.6 0.0 0.0	4599.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.1000DE+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 cc Enhanced by 1.500E+00 cc Enhanced by 2.000E+00 cc6h6+h=c6h7c c6h7c+h02=c6h6+h02 c6h7c+h02=c6h6+h202 c6h7c+h02=>cpd+hc0+oh	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12	0.61: 1.6 0.0 0.0 0.0	4599.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 c6h6+h=c6h7c c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+h02=c6h6+h202 c6h7c+h02=c6h6+h20	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 h20 Enhanced by 0.000E+00 ch4 Enhanced by 1.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h02 c6h7c+h02=c6h6+h202 c6h7c+b0=cb6+h202 c6h7c+o=c6h6+h20 c6h7c+o=c6h6+h20	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co6h6+h=c6h7c c6h7c+02=c6h6+h02 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h6+h=c6h7c c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=cch6	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+b2=c6h6+h202 c6h7c+b=c6h6+h20 c6h7c+b=c6h6+h20 c6h7c+b=c6h6+h20 c6h7c+b=c6h6+h2 c6h7c+b=c6h6+h2 c6h7c+b=c6h6+h2 c6h7c+b=c6h6+h2 c6h7c+b=c6h6+h2 c6h7c+b=c6h6+h2 c6h7c+b=c6h6+h2	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2479.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 c6h6+h=c6h7c c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+b02=c6h6+h202 c6h7c+b02=c6h6+h20 c6h7c+ch=c6h6+h2 c6h7c+ch=c6h6+h2 c6h7c+ch=c6h6+h2 c6h7c+ch=c6h6+h2 c6h7c+ch=c6h6+h2 c6h7c+ch=c6h6+h2 c6h7c+ch=c6h6+h2	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2477. 2479. 2479. 2480.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h02 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+c14 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2477. 2478. 2479. 2480. 2481.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h7+c02=c6h6+h02 c6h7c+h02=c6h6+h202 c6h7c+h02=c6h6+h202 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+c14 c6h7c+c13=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h5=c6h6+c2h4 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2479. 2480. 2481. 2482.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.1000DE+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 cc0 Enhanced by 1.500E+00 cc2 Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+h02=c6h6+h202 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+c3=c6h6+c4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2479. 2480. 2480. 2481. 2482. 2483.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.1000DE+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+c3=c6h6+cA4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12	0.61: 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2478. 2478. 2480. 2481. 2482. 2482. 2483. 2484.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 co2 Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h02 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+c3=c6h6+c44 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2479. 2480. 2481. 2482. 2481. 2482. 2483. 2484. 2485.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 2.000E+00 cofhc+h=c6h7c c6h7c+02=c6h6+h02 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+0=c2h6+h20 c6h7c+0=c2h6+h20 c6h7c+0=c2h6+h20 c6h7c+0=c2h6+h20 c6h7c+0=c2h6+h20 c6h7c+0=c2h6+c2h c6h7c+0=c2h6+c2h c6h7c+c2h3=c6h6+c2h6 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c2h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+bc0=c6h6+ch20 c6h6+h=c6h5+h2	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.50E+08	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2479. 2480. 2481. 2482. 2481. 2482. 2483. 2484. 2485.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h6+h=c6h7c c6h7c+02=c6h6+h02 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h5=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h5=c6h6+c2h6 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h6+c3h6 c6h7c+c6h5+h2 Reverse Arrhenius coefficients:	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.50E+08 1.69E+04	0.61: 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2476. 2477. 2478. 2481. 2481. 2481. 2482. 2483. 2484. 2485.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.1000DE+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 cc0 Enhanced by 1.500E+00 cc2 Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+c3=c6h6+c4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-s=c6h5+h2 c6h7c+c3h5-s=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.50E+08 1.69E+04 2.02E+03	0.61: 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2476. 2477. 2478. 2479. 2480. 2480. 2481. 2482. 2483. 2484. 2485. 2486. 2486.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.1000DE+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+02=c6h6+h202 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h2 c6h7c+c3=c6h6+ch4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5-t=c6h5+c3h6 c6h7c+c3h5	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+	0.61: 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2480. 2480. 2481. 2482. 2484. 2483. 2484. 2485. 2486. 2486. 2488.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co C6h7c+02=c6h6+h02 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+0=c6h6+h20 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c2h3=c6h6+c2h4 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5==c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5+b2 Reverse Arrhenius coefficients: c6h6+o=c6h5+h2	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.50E+08 1.69E+04 2.02E+03 7.80E+06 1.20E+13	0.61 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
2470. 2471. 2472. 2473. 2474. 2475. 2476. 2477. 2478. 2479. 2480. 2481. 2482. 2483. 2484. 2485. 2486. 2487. 2488. 2489.	Low pressure limit: 0.66000E+76 -0.16300E+02 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+00 h2 Enhanced by 2.000E+00 ch4 Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 1.500E+00 co Enhanced by 2.000E+00 co Enhanced by 2.000E+00 c6h7e+02=c6h6+h02 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+02=c6h6+h20 c6h7c+0=cpd+hco c6h7c+0=cpd+hco c6h7c+ch3=c6h6+c2h c6h7c+c3h5-a=c6h6+c3h6 c6h7c+c3h5-a=c6h5+b2 c6h6+ba	0.70000E+04 0.58490E+03 9.22E+02 3.07E+10 1.00E+12 4.50E+12 6.02E+12 1.80E+13 8.26E+13 3.16E+12 1.00E+13 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.00E+12 4.50E+08 1.69E+04 2.02E+03 7.80E+06 1.20E+13 4.16E+12	0.61: 1.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	4599.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0

					2546. HEX1245=Mc6b6 5.00E+11	0.0	22081.0
2491.	c6h6+c3h5-a=c6h5+c3h6	2.85E+12	0.0	28300.0	2547. Mc6h6=FULVENE 4.26E+13	0.0	49282.0
2492.	c6h6+o2=c6h5+ho2	9.00E+07	2.0	53168.7	2548. Mc6h6=c6h6 3.79E+13	0.0	22000.0
2493.	c6h6+o2=>c6h5o+oh	1.00E+14	0.0	44000.0	$2549 = c^{2}h^{2}+nc^{4}h^{5}(+M) = c^{6}h^{7}c^{2}(+M)$ 4 80E+07	03	4700 0
2494.	c6h6+o=c6h5o+h	1.99E+07	1.8	3970.0	Low pressure $\lim_{n \to \infty} (1n) - 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0$	4	1,00.0
2495.	c6h6+ho2=c6h5+h2o2	4.20E+01	3.6	22217.3	2550. c4b4+c2b2=c6b5+b 1.00E+09	0.0	30010.0
2496.	c6h5+m=lc6h5+m	3.17E+17	0.0	67000.0	2551 c6b6to=cpdtco 6.02E+15	-0.5	14993 0
2497.	lc6h5=>c2h2+nc4h3	1.00E+14	0.0	38000.0	2552. c6h6+c2h3=c6h5+c2h4 2.00E+12	0.0	15000.0
2498.	lc6h5=>c2h2+c2h2+c2h	2.00E+14	0.0	38000.0	2553 cyc6b12=c6b12-1 2 82E+20	-0.7	93010 0
2499.	c6h5+o2=c6h5o+o	2.60E+13	0.0	6120.0	2554 cyc6b11+b(+m)=cyc6b12(+m) 2 40E+13	0 0	0.0
2500.	c6h5+o2=c5h5+co2	2.41E+40	-7.9	26448.0	Low pressure limit. 0 17000E+59 -0 12080E+02 0 11264E+	5	0.0
2501.	c6h5o+oh=>c6h5+ho2	5.00E+12	0.0	1000.0	TROE centering. 0.64900E+00.0.12131E+04.0.12131E+	4 0 11	33705+05
2502.	c6h5+hco=c6h6+co	8.55E+04	2.2	38.0	2555 gug6h12+o2-gug6h11+bo2 8 0.0F13	- 0.10	47590 0
2503.	c6h5=>h+c2h2+c4h2	4.30E+12	0.6	77294.0	2556 cyc6h12tb=cyc6h11tb2 2 270F110	1 4	8229 0
2504.	c6h5+o=>co+c5h5	1.00E+14	0.0	0.0	2557 gradbl2to=gradbl1tob 2.46510	2 7	2106.0
2505.	nc4h3+c2h3=c6h6	2.87E+14	0.0	820.0	257. cycolif2 (b) - cycolif1 (b) 2.001(0) 2.00	1 7	-236 5
2506.	c3h5-a+c3h3=FULVENE+h+h	1.88E+38	-7.5	23880.0	2550. cycolii 2 th 2 cycolii 1 1 1 2 2 1 1 2 5 5 6 cycolii 2 th 2 cycolii 1 1 2 5 2 1 1 2 5 5 6 cycolii 2 th 2 cycolii 1 1 2 5 2 2 1 1 2 5 5 6 cycolii 2 th 2 cycolii 1 1 2 5 2 2 1 1 2 5 5 6 cycolii 2 th 2 cycoliii 2 th 2 cycoliii 2 th 2 cycolii 2	2 5	14150 0
2507.	c4h4+c2h2=c6h6	4.47E+11	0.0	30010.0	2559. Cyconi2+no2-Cyconi1+n202	2.0	E4130.0
2508.	c4h4+c2h=c6h5	3.00E+11	0.0	0.0	2560. Cyconi2+ch3-Cyconi1+ch4 9:06±+00	3.5	10170.0
2509.	nc4h5+c2h2=c6h6+h	1.69E+16	-1.0	8967.0	2561. CyC6n12+C3n5-a=CyC6n11+C3n6 4.80E+02	3.3	18170.0
2510	nc4h5+c2h2=FULVENE+h	1 74E+19	-1 9	12383 0	2562. Cyconii=Coniiio 2.59E+32	-0.3	52020.0
2511	i c 4h5 + c 2h2 = c 6h6 + h	8 25E+24	-3.8	24562 0	2563. cyc6n11+02=cyc6n10+no2 3.16E+12	0.0	5000.0
2512	i c 4 b 5 + c 2 b 2 = FULVENE + b	9 70F+25	-3.8	21326.0	2564. cyc6n11=cyc6n10+n 5./3E+32	-6.5	32206.0
2513	$a^2b^3+pa^4b^5-a^6b^6+b^2$	1 9/5-13	7 1	-3600.0	2565. cyc6h10=c4h6+c2h4 1.15E+12	0.9	6/186.0
2514	$c_{2h_{2+c_{2h_{2}}}}$	1.04E-15 1.26E+56	-12 6	23515 0	2566. cyc6h10=cc6h813+h2 5.00E+13	0.0	61700.0
2515	c3h3+c3h3=c6h6	3 995+50	-11 0	20320.0	2567. cyc6h10+o=cc6h914+oh 5.20E+13	0.0	5200.0
2516	FILLVENE=c6b6	2 95F+31	-11.0	88465 0	2568. cyc6h10+h=cc6h914+h2 1.80E+07	2.0	5000.0
2517	-2h2La2h2=c6h5Lh	2.900-122	-5.0	15040.0	2569. cyc6h10+oh=cc6h914+h2o 5.20E+06	2.0	-770.0
2517.		2.02E+33	-0.0	10100 0	2570. cyc6h10+ho2=cc6h914+h2o2 6.00E+12	0.0	15500.0
2518.	FULVENE+N=CONO+N	2.20E+2/	-3.5	112220 0	2571. cyc6h10+ch3=cc6h914+ch4 4.00E+11	0.0	9600.0
2519.	FULVENE=CONS+N	8.JIE+24	-2.5	113330.0	2572. cyc6h10+o=cc6h913+oh 1.80E+11	0.7	3250.0
2520.	FULVENE+N=>COND+N2	1.42E+08	1.8	1200 4	2573. cyc6h10+h=cc6h913+h2 1.08E+05	2.5	-1900.0
2521.		2.02E+03	2.9	1289.4	2574. cyc6h10+oh=cc6h913+h2o 6.00E+06	2.0	-1520.0
2522.	FULVENE+O=>COND+ON	7.80E+06	2.2	9205.6	2575. cyc6h10+ho2=cc6h913+h2o2 6.00E+12	0.0	13500.0
2523.	FULVENE+OZ=>C6n5+noZ	9.00E+07	2.0	53168.7	2576. cyc6h10+ch3=cc6h913+ch4 2.00E+11	0.0	7300.0
2524.	FULVENE+nOZ=>C6n5+nZOZ	4.20E+01	3.6	22217.3	2577. cyc6h10+c3h5-a=cc6h913+c3h6 4.80E+02	3.3	18170.0
2525.	FULVENE+Cn3=>C6n5+Cn4	4.16E+12	0.0	14628.8	2578. cc6h914=c6h9146 3.30E+13	0.0	22500.0
2526.	C6h50=C5h5+C0	6.90E+23	-3.0	58203.8	2579. cc6h914=c6h9156 2.00E+13	0.0	35500.0
2527.	c6h5oh(+m)=c6h5o+h(+m)	3.33E+17	-0.5	91600.7	2580. cc6h913=cc6h813+h 1.50E+13	0.0	50500.0
	Low pressure limit: 0.25600E+95 -0.28210E+02	0.12598E+	06		2581. cc6h913=c6h9136 1.90E+12	0.6	45240.0
2528.	c6h5oh=c6h5+oh	2.00E+16	0.0	111000.0	2582. c6h9146=c2h3+c4h6 2.00E+13	0.0	50000.0
2529.	c6h5oh+oh=>c6h5o+h2o	6.00E+09	1.0	2405.2	2583. c6h9146=c6h8135+h 3.20E+13	0.0	40700.0
2530.	c6h5oh+ho2=>c6h5o+h2o2	3.20E+06	2.0	18857.8	2584. c6h9156=c2h2+c4h714 2.00E+13	0.0	33000.0
2531.	c6h5oh+h=c6h5o+h2	4.81E+00	3.8	3923.9	2585. mcp=ch3+cyc5h9 3.59E+45	-8.6	97430.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.70E-02	4.2	19955.4	2586. mcp=c6h12-1 6.71E+15	0.0	82840.0
2532.	c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4	1.44E+04	2.5	5049.6	2587. mcp=c6h12-2 1.68E+15	0.0	82840.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.90E+04	2.8	21955.3	2588. mcp=pent2mld 2.52E+15	0.0	84840.0
2533.	c6h5oh+o=c6h5o+oh	2.81E+13	0.0	7352.0	2589. mcp=pent4m1d 2.52E+15	0.0	84840.0
2534.	c6h5oh+o2=>c6h5o+ho2	4.46E+06	1.7	30497.1	2590. mcp=pent3mld 2.52E+15	0.0	84840.0
2535.	c6h5o+ho2=>c6h5oh+o2	3.25E+05	1.8	-4223.0	2591. mcp=c3h6+c3h6 1.78E+16	0.0	95060.0
2536.	c6h5o+h=co+cpd	2.00E+13	0.0	0.0	2592. mcp+o2=mcpm+ho2 2.00E+13	0.0	50930.0
2537.	c6h5o+oh=>co+hco+nc4h5	5.00E+12	0.0	0.0	2593. mcp+o2=mcpt+ho2 4.00E+13	0.0	44000.0
2538.	c6h5o+ho2=>oh+co+hco+2c2h2	1.00E+12	0.0	6000.0	2594. mcp+o2=mcps1+ho2 8.00E+13	0.0	47590.0
2539.	c6h5o+o=>co+co+nc4h5	3.00E+14	0.0	0.0	2595. mcp+o2=mcps2+ho2 8.00E+13	0.0	47590.0
2540.	c6h5oh=cpd+co	8.62E+15	-0.6	74115.0	2596. mcpm+h(+m) = mcp(+m) 3 $60E+13$	0 0	0 0
2541.	c6h5oh+c2h3=c6h5o+c2h4	6.00E+12	0.0	0.0	Low pressure limit. 0 15000E+49 -0 93200E+01 0 58340E+0	4	5.0
2542.	c3h3+c3h3=c6h615	1.00E+13	0.0	0.0	TROE centering. 0 /0000000000000000000000000000000000	4 0 5	00002+05
2543.	nc4h3+c2h2=c6h5	7.00E+14	-0.9	6400.0	2507 mont+h(+m)=mon(+m) 0.49000E+00 0.15140E+04 0.15140E+02507 mont+h(+m)=mon(+m) 2.40E+13	. 0.0	0.0000000000000000000000000000000000000
2544.	c3h3+c3h2=c6h5	7.00E+12	0.0	0.0	Low pressure limit. 0 $1/700\pm62 = 0.120/0\pm102$	4	0.0
2545.	c6h615=HEX1245	5.40E+11	0.0	35804.0	10, pressure rimite. 0.14/005/02 0.12/405/02 0.000005/	-	

	TROE centering:		0.0000E+	00 0.14564E+04	0.10000E+04	0.100	00E+05
2598.	mcps1+h(+m)=mcp((+m)			2.40E+13	0.0	0.0
	Low pressure lim	nit:	0.17000E+	59 -0.12080E+02	0.11264E+05		
	TROE centering:		0.64900E+	00 0.12131E+04	0.12131E+04	0.133	70E+05
2599.	mcps2+h(+m)=mcp((+m)			2.40E+13	0.0	0.0
	Low pressure lim	nit:	0.17000E+	59 -0.12080E+02	0.11264E+05		
	TROE centering.		0 64900E+	00 0 12131E+04	0 12131E+04	0 133	70E+05
2600.	mcp+h=mcpm+h2				3.67E+03	3.1	5343.0
	Declared duplica	ate rez	action				
2601	mcp+h=mcpm+h2	200 200			1 63E+14	0 0	13674 5
2002.	Declared duplica	ate re:	action		1.002.11	0.0	100/110
2602	mcp+h=mcpt+h2	ACC IC			4 20E+06	2 0	2400 0
2603	mcp+h=mcps1+h2				9 60E+08	1 5	4848 0
2604	mcp+h=mcps2+h2				9 60E+08	1 5	4848 0
2605	mcp+n mcpb2+n2 mcp+o=mcpm+oh				9 65E+04	2 7	3716 0
2606	mcp+o=mcpt+oh				1 00E+13	0 0	3280 0
2607	mcp+o=mcps1+oh				9 54E+04	27	2106.0
2608	mcp+o=mcps2+oh				9 54E+04	2 7	2106.0
2600.	mcp+oh=mcpm+h2o				2 00E+07	1 8	31.8
2610	mcp+oh=mcpt+h2o				5 12E+05	2 1	-1834 0
2611	man+oh=mans1+h2o				2 315+07	1 0	-502 7
2612	map+oh=maps2+h2o	,			1 548+06	2 1	-956 /
2613	mcp+011=ncp52+120	, 			2 64E-01	4.3	17265 0
2614	mcp+1102=11cp11+1120	2			1 005+12	4.5	14000 0
2014.	mcp+no2=mcpt+n20	2			2 000104	2.5	14170 0
2013.	map the 2=maps 2 th 2	.02			3.00ETU4	2.5	14170.0
2010.	mep+noz=mepsz+nz	.02			3.00ETU4	2.5	7154 0
2017.	mcp+cn3=mcpm+cn4				4.52E-01	3.0	7154.0
2018.	mep+en3=mept+en4				1.00E+11	0.0	7900.0
2619.	mcp+cn3=mcps1+cn	14			5.41E+04	2.3	7287.0
2620.	mcp+cn3=mcps2+cn	14			5.416+04	2.3	/28/.0
0.001	C1 1 1 1 C () N				0.007.00	0.4	10704 0
2621.	c6h1116(+M)=mcpm	ι(+M)			3.82E+08	0.4	10704.0
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim	n(+M) nit: (0.92000E-2	28 0.14280E+02	3.82E+08 -0.60250E+03	0.4	10704.0
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lin TROE centering:	n(+M) nit: (0.92000E-2 0.18980E+	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lin TROE centering: h2	n(+M) nit: (Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o	n(+M) nit: (Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 2.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 2.000E+00 1.500E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lin TROE centering: h2 ch4 co co2	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lin TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 cc2h6 ar	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02	0.4	10704.0 00E+05
2621.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5	t(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21	0.4 0.500	10704.0 00E+05 38025.1
2621. 2622. 2623.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lin TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2m1d5 mcps1=cyc5h8+ch3</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11	0.4 0.500 -2.4 0.8	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0
2621. 2622. 2623. 2624.	c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=c6h1126	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21	0.4 0.500 -2.4 0.8 -2.4	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1
2621. 2622. 2623. 2624. 2625.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=cent2mld5</pre>	(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E- 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21 3.57E+21	0.4 0.500 -2.4 0.8 -2.4 -2.4	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2626.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lin TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=ceh1126 mcps2=c6h1115</pre>	(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21	0.4 0.500 -2.4 0.8 -2.4 -2.4 -2.4	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1 38025.1
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2626. 2627.	<pre>c6h1116(+M) =mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=c6h1126 mcps1=pent3mld5 mcps2=pent4mld5</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2626. 2627. 2628.	<pre>c6h1116(+M) =mcpm Low pressure lin TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cc5h8+ch3 mcps1=c6h1126 mcps2=c6h1115 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	0.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.8	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 34990.0
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2624. 2625. 2627. 2628. 2629.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=c6h1126 mcps1=pent3mld5 mcps2=c6h1115 mcps2=pent4mld5</pre>	n(+M) nit: (D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.8 0.0	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 34990.0 39000.0
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2626. 2627. 2628. 2629. 2629. 2629.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=cch1126 mcps2=pent3mld5 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5 mcpm=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09 3.00E+13 5.79E+30	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.8 0.0 -5.2	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 38025.3
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2626. 2627. 2628. 2629. 2630. 2631.	<pre>c6h1116(+M) =mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=cch1126 mcps1=pent3mld5 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5 mcpm=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcpt=mcptd+h</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 0.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09 3.00E+13 5.79E+30 1.50E+13	0.4 0.500 -2.4 0.8 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.0 -5.2 0.0	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 34990.0 39000.0 42963.5 37500.0
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2626. 2627. 2628. 2629. 2630. 2631. 2632.	<pre>c6h1116(+M) =mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=c6h1126 mcps1=c6h1126 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5 mcpt=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcpt=mcptd+h mcps1=mcptd+h</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09 3.00E+13 5.79E+30 1.50E+13 2.89E+30	0.4 0.500 -2.4 0.8 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.8 0.0 5.2 0.0 -5.2	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.5 37500.0 42963.5 37500.0
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2624. 2625. 2629. 2629. 2629. 2630. 2631. 2632. 2633.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=cch1126 mcps1=pent3mld5 mcps2=c6h1126 mcps2=cch1115 mcps2=pent4mld5 mcpm=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcpt=mcptd+h mcps1=mcps1d+h mcps2=mcps1d+h</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E- 0.18980E- ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09 3.00E+13 5.79E+30 1.50E+13 2.89E+30 2.89E+30	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.8 0.0 -5.2 -5.2 -5.2	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 39000.0 42963.5 37500.0
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2624. 2625. 2628. 2629. 2630. 2631. 2632. 2633. 2634.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cy5h8+ch3 mcps1=c6h1126 mcps2=pent3mld5 mcps2=c6h1115 mcps2=pent4mld5 mcps1=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcps1=mcptd+h mcps1=mcps1d+h mcps2=mcps2d+h</pre>	n(+M) nit: (_ Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 3.57E	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.0 -5.2 0.0 -5.2 -5.2 -5.2	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 38025.1 38025.1 38025.1 34990.0 39000.0 42963.5 37500.0 42963.5 42963.5
2621. 2622. 2623. 2624. 2624. 2625. 2628. 2629. 2630. 2631. 2631. 2633. 2633. 2633. 2633.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=cch1126 mcps1=pent3mld5 mcps2=c6h1115 mcps2=pent4mld5 mcps1=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcpt=mcptd+h mcps1=mcptd+h mcps1=mcps1d+h mcps2=mcps2d+h mcps2=mcps2d+h mcpm=mcps2</pre>	n(+M) nit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E+00	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09 3.00E+13 5.79E+30 1.50E+13 2.89E+30 2.89E+30 9.55E-02	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.0 -5.2 0.0 -5.2 -5.2 3.4	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 3900.0 42963.5 37500.0 42963.5 5 42963.5 5 15367.0
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2626. 2627. 2628. 2629. 2630. 2631. 2632. 2633. 2633. 2634. 2635. 2634.	<pre>c6h1116(+M) =mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcps1=pent2mld5 mcps1=cpc5h8+ch3 mcps1=c6h1126 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5 mcps1=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcps1=mcptd+h mcps1=mcps1d+h mcps2=mcps1d+h mcps2=mcps1d+h mcps2=mcps2d+h mcps2=pent2mld5=c2h4+i</pre>	n(+M) mit: (Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan S	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 9.59E+11 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09 3.00E+13 5.79E+30 1.50E+13 2.89E+30 2.89E+30 9.55E-02 3.30E+13	0.4 0.500 -2.4 0.8 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -5.2 0.0 -5.2 -5.2 -5.2 -5.2 3.4 0.0	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 39025.1 3902
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2624. 2625. 2629. 2630. 2631. 2632. 2633. 2633. 2633. 2635. 2635. 2635. 2635.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cyc5h8+ch3 mcps1=ch1126 mcps1=pent3mld5 mcps2=c6h1126 mcps2=c6h1126 mcps2=pent4mld5 mcps1=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcpt=mcptd+h mcps1=mcps1d+h mcps2=mcps2d+h mcps2=mcps2d+h mcps2=pent2mld5=c2h4+i pent3mld5=c2h4+i</pre>	n(+M) nit: (_ Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan S 	D.92000E- 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 3.57E+21 6.46E+09 3.00E+13 5.79E+30 1.50E+13 2.89E+30 2.89E+30 2.89E+30 2.89E+30 3.30E+13 3.30E+13	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.8 0.0 -5.2 -5.2 -5.2 -5.2 -5.2 -5.2 -5.2 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 2250.0 42963.5 42963.5 42963.5 42963.5 42963.5 42963.5
2621. 2622. 2623. 2624. 2625. 2624. 2625. 2628. 2629. 2630. 2631. 2632. 2633. 2634. 2635. 2634. 2635. 2634. 2635. 2638.	<pre>c6h1116(+M)=mcpm Low pressure lim TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar mcpt=pent2mld5 mcps1=cy5h8+ch3 mcps1=cch1126 mcps1=pent3mld5 mcps2=pent4mld5 mcps2=pent4mld5 mcps1=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcpt=mcpmd+h mcps1=mcps1d+h mcps2=mcps2d+h mcps2=mcps2d+h mcpm=mcps2 pent2mld5=c2h4+i pent3mld5=c2h4+i pent4mld5=c3h6+c</pre>	n(+M) nit: (_ Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan Enhan S .c4h7 .4h713 :3h5-a	D.92000E-2 0.18980E+ ced by ced by ced by ced by ced by ced by	28 0.14280E+02 02 0.21400E+03 2.000E+00 6.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	3.82E+08 -0.60250E+03 0.28000E+02 3.57E+21 3.57E	0.4 0.500 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 -2.4 0.8 0.0 -5.2 0.0 -5.2 -5.2 -5.2 -5.2 3.4 0.0 0.0 0.0 0.0	10704.0 00E+05 38025.1 30710.0 38025.1 3900.0 42963.5 42963.5 42963.5 15367.0 22500.0 22500.0 22500.0 22500.0

2640	pant2m1dm=c3h4-a+nc3h7	2 00E+13	0 0	50000 0
2610.	pont2m1d2=icopolob2	1 200112	0.0	20200.0
2642.	peritzinitus=150perciis	2 600112	0.0	20200.0
2042.	peric4mid3=c5n8i5+cn5	2.00ET13	1.0	38200.0
2643.	pentzmid5=pentzmidm	2.54E+07	1.0	9000.0
2644.	pent2mld3=pent2mld3	5./5E+08	1.0	32500.0
2645.	pent4mld5=pent4mld3	5./5E+08	1.0	32500.0
2646.	mcpm+o2=mcpmd+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0
2647.	mcpt+o2=mcpmd+ho2	6.90E+11	0.0	5000.0
2648.	mcpt+o2=mcptd+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
2649.	mcps1+o2=mcptd+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0
2650.	mcps1+o2=mcps1d+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
2651.	mcps2+o2=mcps1d+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
2652.	mcps2+o2=mcps2d+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
2653.	mcpmds1+o2=mcpmds1d+ho2	1.58E+12	0.0	15200.0
2654.	mcptds2+o2=mcptds2d+ho2	5.27E+11	0.0	15200.0
2655.	mcptds2+o2=mcpmds1d+ho2	5.27E+11	0.0	15200.0
2656.	mcptds2+o2=mcptds1d+ho2	5.27E+11	0.0	15200.0
2657.	mcps2dt+o2=mcptds2d+ho2	5.20E+11	0.0	2500.0
2658	mcntds1b+o2=mcntds1d+bo2	1 58E+12	0 0	15200 0
2659	mcns2ds1+o2=mcntds2d+ho2	7 90E+11	0.0	15200.0
2660	mcps2ds1+o2=mcp2ds2d+no2	7 90E+11	0.0	15200.0
2661	mapmd+ab=aya5b0+ab2a	1 375+12	0.0	-1040 0
2001.	mepmd+on-cycon9+cn20	1.3/6712	0.0	-1040.0
2002.	mepma+n=mepmas1+n2	1.08E+05	2.5	-1900.0
2003.	mepma+on=mepmas1+n20	0.00E+06	2.0	-1520.0
2664.	mcpmd+ho2=mcpmds1+h2o2	1.28E+04	2.6	12400.0
2665.	mcptd+h=mcpmds1+h2	1.74E+05	2.5	2510.0
2666.	mcptd+oh=mcpmds1+h2o	3.00E+06	2.0	-298.0
2667.	mcptd+h=mcptds2+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
2668.	mcptd+oh=mcptds2+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
2669.	mcptd+h=mcptds1b+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
2670.	mcptd+oh=mcptds1b+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
2671.	mcps1d+h=mcptds2+h2	2.50E+04	2.5	-2790.0
2672.	mcps1d+oh=mcptds2+h2o	1.30E+06	2.0	-2620.0
2673.	mcps1d+h=mcps2ds1+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
2674.	mcps1d+oh=mcps2ds1+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
2675.	mcps2d+h=mcps2ds1+h2	1.08E+05	2.5	-1900.0
2676.	mcps2d+oh=mcps2ds1+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
2677.	mcpmds1d+h=mcptds1dp+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
2678.	mcpmds1d+oh=mcptds1dp+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
2679.	mcpmds1d+h=mcptds1ds+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
2680.	mcpmds1d+oh=mcptds1ds+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
2681	mcptdsld+h=mcptdsldp+h2	8.94E-01	4.3	-400.0
2682	montds1d+oh=montds1dn+h2o	1 00E+14	0.0	1714 0
2683	mcntds1d+h=mcn2dt+h2	5 40E+04	2.5	-1900 0
2684	mont ds1d+oh=mon2dt+h2o	3 005+06	2.0	-1520.0
2004.	ment do2d h=men2dt h2	5.001100	2.0	1000 0
2000.	meptasza+n=mepzat+nz	5.40E+04	2.5	-1900.0
2000.	meptasza+on=mepzat+nzo	1.00E+14	0.0	1/14.0
2687.	mcptds2d+n=mcptds2ap+n2	1.74E+05	2.5	2510.0
2688.	mcptds2d+on=mcptds2dp+h2o	3.00E+06	2.0	-298.0
2689.	mcp2dt=mcptds1dp	3./8E+U3	2.5	33870.0
2690.	mcptds1dp=mcptds2dp	1.17E+11	0.7	27741.0
2691.	mcpmds1=c2h4+ic4h5	1.00E+13	0.0	35400.0
2692.	mcptds1b=>ch3+c2h2+c3h4-a	1.00E+13	0.0	35400.0
2693.	cpd+ch3=mcps2ds1	6.30E+10	0.0	7490.0
2694.	c5h5+ch3=mcp2d	2.38E+94	-23.5	45191.3
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.89E+84	-20.2	106570.2
2695.	mcp2d=mcp2dp+h	1.07+116	-30.4	147411.6
2696.	mcp2d=mcp2dt+h	5.77E+97	-24.0	122314.6

2748.	cyc5h8+c2h3=cyc5	5h7+c2h4		4.00E+11	0.0	16800.0
2749.	cyc5h8+c2h5=cyc5	5h7+c2h6		8.80E+00	3.5	4140.0
2750.	cyc5h8+c3h5-a=cy	yc5h7+c3h6		4.00E+01	3.3	18170.0
2751.	cyc5h8+c5h7=cyc5	5h7+c5h813		3.20E+02	3.3	18170.0
2752.	cvc5h8+c5h5=cvc5	5h7+cpd		1.60E+11	0.0	12400.0
2753.	cvc5h8=cpd+h2	-1-		2.24E+13	0.0	60010.0
2754	cyc5h8+o2=cyc5h7	7+ho2		2 80E+12	0.0	35600 0
2755	cyc5h8=c5h813	11102		1 15E+20	-0.9	86230 0
2756	cyc5h8+cyc5h8=cy	vc5h7+cvc5h9		2 53E+14	0.0	55240 0
2757	cycollorcycollo-cy	VCDII//CYCDII/		1 108-03	3.6	-14070 0
2750	opd+h=Cyc5h7	- 2		1.10E-03	3.0	10000 2
2750.	cpu+noz=cyc3n7+c)Z		2.0JE-04	4.5	10999.2
2759.	cycon/+oz=cznoci	10+CHZCHO		1.70E+09	1.0	20230.0
2760.	cycon/+on=cpa+n2	20		6.U2E+12	0.0	0.0
2761.	cyc5h/+o=cpd+oh			1.80E+13	0.0	0.0
2762.	cyc5h7+h=cpd+h2			1.80E+13	0.0	0.0
2763.	cyc5h7+h=cyc5h8			1.00E+14	0.0	0.0
2764.	cyc5h7+o=c4h6+ho	co		8.26E+13	0.0	0.0
2765.	c5h7=cyc5h7			7.89E+11	0.3	35600.0
2766.	c5h5+h=cpd			2.71E+63	-14.8	21050.0
2767.	cpd(+M)=c2h2+c3h	n4-a(+M)		3.80E+17	0.0	104000.0
	Low pressure lin	mit: 0.10000E+	99 -0.22250E+02	0.12632E+0	06	
	TROE centering:	0.14410E+	-00 0.53580E+01	0.32840E+0	0.67	100E+10
	со	Enhanced by	1.500E+00			
	co2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6 000E+00			
	h2	Enhanced by	2 000E+00			
	ch4	Enhanced by	2 000E+00			
2768	c3h/=n+c2h3=cnd+	- ⊔inianeea by ⊧h	2.0001.00	5 008+11	0 0	3000 0
2760	a3h4-a+a2h3-apd	LP		5.0001111	0.0	3000.0
2709.	c3h3+c2h4-cpd+h	-11		5 000110	0.0	20400.0
2770.	condub-cEhEub2			5.00E+10	0.0	20400.0
2771.	cpu+n=c5n5+nz			J. 00E+12	0.0	94,33.0
2772.	cpa+n=c5n/			1.146+14	-0.2	3100.0
2773.	cpa+o=cono+on			1.35E+07	2.0	2579.5
2//4.	cpa+o=nc4n5+co+r	1		8./UE+51	-11.1	33240.0
2//5.	cpa+o=c4n6+co			2.50E+12	0.0	0.0
2776.	cpd+o=b-acyc5h5c	o+h		8.91E+12	-0.1	590.0
2777.	cpd+o=a-acyc5h5c	o+h		5.60E+12	-0.1	200.0
2778.	cpd+o=ch2co+c3h4	1-a		3.00E+12	0.0	0.0
2779.	cpd+o=ch2co+c3h4	1-p		3.00E+12	0.0	0.0
2780.	cpd+oh=c5h5+h2o			1.00E+14	0.0	1714.0
2781.	cpd+ho2=c5h5+h2c	52		1.22E-09	6.3	7591.3
2782.	cpd+hco=c5h5+ch2	20		1.08E+08	1.9	16000.0
2783.	cpd+ch3=c5h5+ch4	1		1.60E+03	2.9	4300.0
2784.	cpd+c2h3=c5h5+c2	2h4		1.20E-01	4.0	0.0
2785.	cpd+c3h5-a=c5h5+	+c3h6		2.41E+05	2.0	15253.3
2786.	cpd+h=>c3h5-a+c2	2h2		7.74E+36	-6.2	32890.0
2787.	c5h5=lc5h5			1.84E+94	-24.4	79300.0
2788.	lc5h5=c3h3+c2h2			1.01E+68	-16.1	83000.0
2789.	c5h5=>c3h3+c2h2			2.00E+12	0.0	68000.0
2790.	c3h3+c2h2=>c5h5			7.55E+99	-24.4	128200.0
2791.	c5h5+o2=c5h4o+oh	ı		8.77E+01	3.1	23496.0
2792.	c5h5+o2=c2h3chch	no+co		2.19E+09	0.5	24058.0
2793	c5h5+o2=c4h4o+bc			2.62E+13	-0.7	27939.0
2794	c5h5+o2=c5h5o24+	+0		1.06E+15	-0.3	51792.0
2795	c5h5+o=nc4h5+co	-		5 75E+14	-0.3	6180 0
2796	c5h5+o=c5h4o+b			2 79E+13	-0 1	2720 0
2797	c5h5+h02=c5h5o2/	1+0h		6 868+10	0.1	5088 6
2798	c5h5+ho2=c5h4o+h	120		1 19E+33	-6 5	13400 0
2120.	C3113+1102=C31140+1	120		T.T.20-22	-0.5	10400.0

2799	c5h5+ho2=c5h5ooh	1 08E+50	-11 9	9210 0
2800	c5b5oob=c5b5o24+ob	1 59E+20	-1 5	42857 5
2801	c5h5+bo2=>oh+co+nc4h5	5 00E+11	0.0	0.0
2802	c5h5+ho2=>oh+hco+c4h4	3 00E+12	0 0	0 0
2803	c5h5+oh=>co+c2h4+c2h2	2 00E+14	0.2	4350 0
2804	c5h5+oh=>h+ch2co+c3h3	3 50E+13	0.2	4350 0
2805	c5h5+oh=c5h4oh+h	1 06E+12	0.2	15960 0
2806	c5h5+oh=c4h6+co	1 16E+20	-1.8	16780 0
2807	c5h5+oh=a-acyc5h5o+h	4 12E+14	-0.1	18980 0
2808	c5h5+oh=b=acyc5h5o+h	6 73E+13	0.2	13690.0
2809	c4h4o+h=c3h5-a+co	6 60E+13	-0.0	2740 0
2005.	Declared duplicate reaction	0.001110	0.0	2/10.0
2810	c4b4o+b=c3b5-a+co	5 908+06	2 0	1300 0
2010.	Declared duplicate reaction	3.901100	2.0	1000.0
2811	c4b4o+o=cb2cbo+bcco	3 00E+08	1 4	-860 0
2812	c4h4o+oh=c3h5-a+co2	3 00E+12	0.0	0.00
2813	c5b5o24=c5b4o+b	5 06E+18	-2 5	9508.0
2814	c5h5o24=nc4h5+co	1 10E+79	-19 6	66250 0
2815	c5h5o24+o2=c5h4o+ho2	1 00E+11	0.0	0.0
2816	nc4h5+co=c4h5co	1 51E+11	0.0	4810 0
2817	chchcho=c2h3co	1 40E+09	1 0	32100.0
2818	c2h2+hco=chchcho	7 77E+06	1 4	7755 0
2819	c5h4ob=co+nc4h5	5 69E+45	-9.2	77650 0
2820	c5h4ob+b=c5b5ob	1 00E+14	0.0	,,000.0
2821	c5h4ob+b=c5h4o+b2	2 10E+13	0.0	54000 0
2822	c5h4ob+o2=c5h4o+bo2	3 00E+13	0.0	5000.0
2823	c5h4o=co+c2h2+c2h2	5.00E+13	-4.3	87430 0
2824	c5h4o=co+c4h4	6 34E+35	-5 9	107500 0
2825	c5h4o+b=nc4h5+co	8 82E+28	-3 9	19590.0
2826	c5h4o+h=c5h4oh	1 47E+30	-4.7	14650 0
2020.	c5h4o+h=c5h3o+h2	2 005-12	-4.7	P100.0
2027.	c5h4o+n=c5h3o+n2	1 405+13	0.0	1470 0
2829	c5h4o+o=co+bco+c3h3	1 20110	1 4	-858 0
2830	c5h4o+o=c5h3o+b2o	1 10E+08	1 4	1450.0
2831	c5h30+b=c5h40	1 00E+14	1.1	1400.0
2832	c5h3o=>c2h2+co+c2h	2 00E+13	0.0	51000 0
2832.	nc4h5+c3h4-a=toluen+h	2.00E+13 2.00E+11	0.0	3700.0
2033.	nc4h5+c3h4-p=toluonth	6 325+11	0.0	3700.0
2835	$c_{3h_3+c_4h_6=t_0}$	3 27E+05	1 3	-4611 0
2836	toluen=c6b5+cb3	1 40E+16	1.5	99800 0
2837	toluen=phch2+h	3 00E+15	0.0	88194 0
2838	toluen+o2=phch2+ho2	3 00E+14	0.0	43062 0
2839	toluen+bo2=phch2+b2o2	3 00E+14	0.0	22010 0
2840	toluen+ob=phch2+h2o	1 778+05	2.4	-602 0
2841	toluen+oh=c6b5ob+cb3	7 83E+02	2.7	3221 0
2842	toluen+o=phch2+oh	6 30E+11	0.0	0.0
2843	toluen+b=phch2+b2	6 47E+00	4 0	3384 0
2844	toluen+h=c6h6+ch3	3 905+08	1 2	2371 0
2845	toluen+ch3=phch2+ch4	8 88F+10	0.0	8754 0
2846	toluen+c2b5=phch2+c2b6	1 01E+11	0.0	9514 0
2847	toluen+c6h5=phch2+c6h6	2 10E+12	0.0	4400 0
2010	toluon+ng(h5=nhch2+g(h6	4 005+12	0.0	7500.0
2040.	toluentnc4no-phch2+c4no	4.00E+12	0.0	7500.0
2049. 2850	c5h5+c2h2=nhch2	4.00ETIZ 1 /AFL17	_1 3	31000.0
20JU. 2851	phch2+o2=phch2+ob	1.40ET1/ 6 310110	-1.3	43000.0
2852	phch2+b2=phcb2o+oh	0.JIETIZ 2 000±13	0.0	43000.0
2853	phch2+ob=phch2ob	2.00ETI3 2 00ETI3	0.0	0.0
2854	phch2+o=phco+h	2.00ETI3 1 58E±13	0.0	0.0
2004.	phone (0-philotti	T.JOE+13	0.0	0.0

phch2+o=c6h5+ch	120		1.00E+13	0.0	0.0	
phch2+c3h3=tolu	ien+c3h2		1.00E+12	0.0	0.0	
phch2+c6h5oh=tc	luen+c6h5o		1.05E+11	0.0	9500.0	
phch2oh+o2=>phh	1co+ho2+h		2.00E+14	0.0	41400.0	
phch2oh+oh=>phh	ico+h2o+h		8.43E+12	0.0	2583.0	
phch2oh+h=c6h6+	-ch2oh		1.20E+13	0.0	5148.0	
phch2oh+phch2=>	phhco+toluen+h		2.11E+11	0.0	9500.0	
phch2oh+c6h5=>p	hhco+c6h6+h		1.40E+12	0.0	4400.0	
phch2o=phhco+h			1.30E+14	0.0	1100.0	
phhco=phco+h			3.98E+15	0.0	83701.0	
phhco+o2=phco+h	102		1.02E+13	0.0	39000.0	
phhco+ho2=phco+	-h2o2		2.00E+12	0.0	11665.0	
phhco+oh=phco+h	120		1.71E+09	1.2	-447.0	
phhco+oh=c6h5oh	u+hco		1 20E+13	0 0	5123 0	
phhco+o=phco+ob	1,1100		9 04E+12	0.0	3080 0	
phhco+b=phco+b?)		5 00E+13	0.0	1928 0	
philco+h=phco+hz			1 205+13	0.0	5149 0	
philco+n=cono+nc	.o		2 775+03	2.0	5773 0	
philco+clis=plico+	-CII4		2.77E+03	2.0	4400 0	
phileo+cons-phile	+C0110		7.01ETII	0.0	4400.0	
phco=c6h5+co	0		3.98E+14	0.0	29401.0	
pnco+o2=c6n5o+c	202		3.00E+10	0.0	2870.0	
phco+ho2=>c6h5+	-co2+oh		2.00E+13	0.0	0.0	
Alc2h3=c6h6+h2c	c		4.80E+13	0.0	78130.0	
c6h5+c2h3=A1c2h	13		1.20E+27	-4.2	7200.0	
c5h5+c3h3=A1c2h	13		1.64E+66	-15.9	27529.0	
Declared duplic	cate reaction					
c5h5+c3h3=A1c2h	13		1.20E+35	-7.4	5058.0	
Declared dupli	cate reaction					
c4h4+c4h4=A1c2h	13		1.48E+14	0.0	37960.0	
Alc2h3+h=c6h6+c	:2h3		5.62E+24	-3.0	19830.0	
Alc2h3+h=c6h5+c	2h4		1.63E+37	-6.3	31672.0	
Alc2h3+o=phch2+	hco		5.43E+19	-1.4	14400.0	
c5h5+c5h5=A2+h+	-h		2.00E+12	0.0	4000.0	
c4h713+ch3(+M)=	=but3m1d(+M)		1.00E+14	-0.3	-262.3	
Low pressure 1:	imit: 0.39100E+	61 -0.12810E+02	0.62500E+)4		
TROE centering:	0.10400E+	-00 0.16060E+04	0.60000E+05 0.61184E+04			
h2	Enhanced by	2.000E+00				
h2o	Enhanced by	6 000E+00				
ch4	Enhanced by	2 000E+00				
CO	Enhanced by	1 500F+00				
202	Billiancea by	T. 300E100				
	Enhanced by	2 0005+00				
C02	Enhanced by	2.000E+00				
c2h6	Enhanced by Enhanced by Enhanced by	2.000E+00 3.000E+00 7.000E=01				
c2h6 ar but 2m1 d+b=but 3m	Enhanced by Enhanced by Enhanced by	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2 505+04	2 5	-2780 0	
c2h6 ar but3m1d+h=but3m	Enhanced by Enhanced by Enhanced by ildt+h2	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04	2.5	-2790.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Hdt+h2 Smldt+h20	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06	2.5	-2790.0 -2620.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but	Enhanced by Enhanced by Enhanced by 11dt+h2 m1dt+h2o 3m1dt+h2o2	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04	2.5 2.0 2.6	-2790.0 -2620.0 10900.0	
c2h6 ar but3m1d+h=but3m but3m1d+oh=but3 but3m1d+oh=but3 but3m1d+ho2=but	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Idt+h2 Mmldt+h2o 3mldt+h2o2 3mldt+ch4	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10	2.5 2.0 2.6 0.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but but3mld+ch3=but3	Enhanced by Enhanced by Enhanced by ildt+h2 3mldt+h2o 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 mld	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14	2.5 2.0 2.6 0.0 0.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+oh=but3 but3mld+ch3=but but3mldt+h=but3	Enhanced by Enhanced by Enhanced by 1dt+h2 3mldt+h2o2 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 mld 1dp+oh	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05	2.5 2.0 2.6 0.0 0.0 2.7	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but3 but3mld+ch3=but3 but3mld+h=but3m but3mld+h=but3m	Enhanced by Enhanced by Enhanced by 1dt+h2 3mldt+h2o2 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 3mld 1dp+oh 1dp+h2	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05 1.88E+05	2.5 2.0 2.6 0.0 0.0 2.7 2.8	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0 6280.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but but3mld+ch3=but3 but3mld++=but3 but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Idt+h2 3mldt+h2o2 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 Bmld 1dp+ch 1dp+h2 Bmldp+h2o	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05 1.88E+05 1.05E+10	2.5 2.0 2.6 0.0 2.7 2.8 1.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0 6280.0 1590.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+oh=but3 but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but3 but3mld+o=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Idt+h2 Mildt+h2o Comparison Enhanced by Mildt+h2o Comparison Co	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05 1.05E+10 1.68E+13	2.5 2.0 2.6 0.0 0.0 2.7 2.8 1.0 0.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0 6280.0 1590.0 20440.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but3m but3mld+h=but3m but3mld+h=but3m but3mld+ho=but3m but3mld+ho2=but	Enhanced by Enhanced by Enhanced by 1dt+h2 3mldt+h2o2 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 mld 1dp+oh 1dp+h2 3mldp+h2o2 3mldp+h2o2 3mldp+ch4	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05 1.05E+10 1.68E+13 9.04E-01	2.5 2.0 2.6 0.0 0.0 2.7 2.8 1.0 0.0 3.6	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0 6280.0 1590.0 20440.0 7154.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+oh=but3 but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but3m but3mld+o=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+oh=but3m but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but	Enhanced by Enhanced by Enhanced by 1dt+h2 3mldt+h2o2 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 bmld 1dp+ch 1dp+h2 3mldp+h2o2 3mldp+h2o2 3mldp+h2o2 3mldp+ch4 ch3	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05 1.88E+05 1.05E+10 1.68E+13 9.04E-01 2.00E+13	2.5 2.0 2.6 0.0 2.7 2.8 1.0 0.0 3.6 0.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0 6280.0 1590.0 20440.0 7154.0 31000.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but but3mld+ch3=but but3mld+h=but3m but3mld+h=but3m but3mld+ho2=but but3mld+ch3=but but3mldp=c4h6+c but3mldp=c3h6+c	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Idt+h2 Smldt+h2o2 Smldt+h2o2 Smldt+ch4 Smld Idp+oh Idp+oh Smldp+h2o2 Smldp+h2o2 Smldp+h2o2 Smldp+ch4 th3 S2h3	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05 1.88E+05 1.05E+10 1.68E+13 9.04E-01 2.00E+13 2.00E+13	2.5 2.0 2.6 0.0 2.7 2.8 1.0 0.0 3.6 0.0 0.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 3716.0 6280.0 1590.0 20440.0 7154.0 31000.0 35500.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but3 but3mld+oh=but3 but3mld+ho2=but but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but but3mldp=c4h6+c but3mldp=c3h6+c but3mldp=isope+	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Idt+h2 Mildt+h2o 3mldt+h2o2 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 Mild Hdp+ch Hdp+h2 3mldp+h2o2 3mldp+ch4 ch3 2ch3 ch	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.00E+14 1.93E+05 1.05E+10 1.68E+13 9.04E-01 2.00E+13 2.00E+13 1.50E+13	2.5 2.0 2.6 0.0 2.7 2.8 1.0 0.0 3.6 0.0 0.0 0.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0 6280.0 1590.0 20440.0 7154.0 31000.0 35500.0 46000.0	
c2h6 ar but3mld+h=but3m but3mld+oh=but3 but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but3m but3mld+o=but3m but3mld+ch3=but but3mld+ch3=but but3mldp=c3h6+c but3mldp=c3h6+c but3mldp=c3h6+c	Enhanced by Enhanced by Enhanced by Idt+h2 3mldt+h2o2 3mldt+h2o2 3mldt+ch4 mld 1dp+ch 1dp+h2 3mldp+h2o2 3mldp+h2o2 3mldp+h2o2 3mldp+ch4 th3 2ch3 ype+ho2	2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01	2.50E+04 1.30E+06 1.60E+04 5.00E+10 1.93E+05 1.88E+05 1.05E+10 1.68E+13 9.04E-01 2.00E+13 1.50E+13 7.50E+10	2.5 2.0 2.6 0.0 2.7 2.8 1.0 0.0 3.6 0.0 0.0 0.0 0.0	-2790.0 -2620.0 10900.0 5600.0 0.0 3716.0 6280.0 1590.0 20440.0 7154.0 31000.0 35500.0 46000.0 2500.0	
	phcn2+conson-cc phch2oh+o2=>phf phch2oh+oh=>phf phch2oh+bhc2=> phch2oh+bhc2=> phch2oh+bhc3=>p phch2o=phhco+h phhco+o2=phco+h phhco+oh=phco+h phhco+oh=phco+h phhco+b=c6h5of phhco+b=phco+d2 phhco+ch3=phco+d2 phhco+c6h5=phco phco+c6h5=phco phco+c6h5+co phco+c2=c6h5o+cc phco+c2=c6h5o+cc phco+c2=c6h5o+cc phco+c2=c6h5+c2 c6h5+c2h3=Alc2t Declared duplic c5h5+c3h3=Alc2t Declared duplic c5h5+c3h3=Alc2t Declared duplic c5h5+c3h3=Alc2t Declared duplic c5h5+c3h3=Alc2t Declared duplic c5h5+c3h3=Alc2t Declared duplic c5h5+c3h3=Alc2t Declared duplic c5h5+c3h3=Alc2t Alc2h3+h=c6h6+cc Alc2h3+h=c6h5+c	<pre>phch2+Censon=Coluen+Censo phch2oh+o2=>phhco+ho2+h phch2oh+oh=>phhco+ho2+h phch2oh+phch2=>phhco+toluen+h phch2oh+phch2=>phhco+toluen+h phch2o=phhco+h phhco+c6h5=>phhco+toluen+h phhco+c2=phco+ho2 phhco+on=phco+ho2 phhco+oh=phco+h2o phhco+oh=phco+h2o phhco+oh=phco+ch4 phhco+h=c6h6+hco phhco+c6h5=phco+c6h6 phco=c6h5+co phco+o2=c6h5o+co2 phco+ho2=>c6h5+co2+oh Alc2h3=Alc2h3 Csh5+c3h3=Alc2h3 Declared duplicate reaction c5h5+c3h3=Alc2h3 Declared duplicate reaction c5h5+c3h3=Alc2h3 Alc2h3+h=c6h6+c2h4 Alc2h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4 Alc3h3+h=c6h5+c2h4</pre>	<pre>phch2+CohSon=Coluen+CohSo phch2oh+o2=>phhco+ho2+h phch2oh+o1=>phhco+ho2+h phch2oh+bech2=>phhco+toluen+h phch2oh=phco+h2 phco2=phco+h2 phhco+o2=phco+h2 phhco+o2=phco+h2 phhco+oh=phco+h2 phhco+oh=phco+h2 phhco+oh=phco+h2 phhco+b=phco+h2 phhco+b=phco+h2 phhco+b=phco+ch4 phhco+b=phco+ch4 phhco+c6h5=phco+c6h6 phco=c6h5+c0 phco+c2=c6h5+cc2 phco+h2=>c6h5+cc2 phco+h2=>c6h5+cc2 phco+c2=c6h5+cc2 phco+c2=c6h5+cc2 phco+c2=c6h5+c2h3 Alc2h3=Alc2h3 Declared duplicate reaction c5h5+c3h3=Alc2h3 Declared duplicate reaction c5h5+c3h3=Alc2h3 Alc2h3+b=c6h6+c2h3 Alc2h3+b=c6h5+c2h4 Alc2h3+b=ch5+c2h4 Alc3h3+b=ch5+c2h4 Alc3h3+b=ch</pre>	phch2+Coh3on=toluen+coh3o 1.00E+14 phch2oh+ol=>phhco+ho2+h 2.00E+14 phch2oh+bac>phhco+bo2+h 8.43E+12 phch2oh+bac>phhco+toluen+h 2.11E+11 phch2oh+bacb=>phhco+c6h6+h 1.40E+12 phch2oh=phco+h 3.0E+14 phch2o=phhco+c6h6+h 1.40E+12 phch2o=phco+h 3.0E+14 phco=phco+h 3.0E+14 phco+o=phco+h 3.0E+14 phco+o=phco+h 3.0E+14 phco+o=phco+h 3.0E+14 phco+o=phco+h 3.0E+14 phco+o=phco+h 3.0E+14 phco+o=phco+h 3.0E+14 phco+o=phco+h20 1.71E+09 phhco+oh=phco+h20 1.71E+09 phhco+oh=phco+h20 1.20E+13 phhco+oh=phco+h2 5.00E+13 phhco+h=phco+h2 5.00E+13 phhco+ch3=phco+c6h6 7.01E+11 phco+c6h5=phco+c6h6 7.01E+11 phco+c6h5+c2h 3.00E+10 phco+ch3=Alc2h3 1.20E+23 ach5+c3h3=Alc2h3 1.20E+23 bclared duplicate reaction c5h5+c3h=Alc2h3 clared duplicate reaction	phch2+Coh3on=tolueinconso 1.02E+11 0.0 phch2oh+o2>>phhco+ho2+h 2.00E+14 0.0 phch2oh+o2>>phhco+to2+h 8.43E+12 0.0 phch2oh+ac=>phhco+toluen+h 2.11E+11 0.0 phch2oh+c6h5=>phhco+toluen+h 1.40E+12 0.0 phch2oh+c6h5=>phhco+c6h6+h 1.40E+12 0.0 phch2oh+c6h5=>phco+c6h6+h 1.40E+12 0.0 phch2o=phco+h 3.98E+15 0.0 phco+oh=phco+h2 1.02E+13 0.0 phhco+oh=phco+h2o 1.71E+09 1.2 phhco+oh=c6h5o+h2o 1.71E+09 1.2 phhco+oh=c6h5o+h2o 1.02E+13 0.0 phhco+oh=c6h6+hco 1.20E+13 0.0 phhco+h3=phco+ch4 2.77E+03 2.8 phhco+c655=phco+c6h6 7.01E+11 0.0 phco+c655=phco+c6h6 7.01E+11 0.0 phco+c655=phco+c6h6 7.01E+11 0.0 phco+c655=phco+c6h6 7.01E+11 0.0 phco+c655=phco+c6h6 7.01E+11 0.0 phco+c655=phco+c6h5 2.00E+12 0.0 c655+c2h3=A1c2h3 1.20E+27	phch2choh2+bm 1.05±11 0.0 5500.0 phch2ch+ol2=>phhco+h2o+h 2.00E±14 0.0 41400.0 phch2ch+bm 8.43E±12 0.0 2583.0 phch2ch+phch2=>phco+toluen+h 1.20E±13 0.0 5148.0 phch2ch+phch2=>phco+toluen+h 1.40E±12 0.0 4400.0 phch2ch+phch2=>phco+toluen+h 1.30E±14 0.0 1100.0 phch2ch+phch2=>phco+toluen+h 1.30E±14 0.0 1100.0 phhco+phc2=phco+h2 1.02E±13 0.0 3900.0 phhco+oh=phco+h2 1.02E±13 0.0 3900.0 phhco+oh=phco+h20 1.71E±09 1.2 -447.0 phhco+oh=phco+h20 1.20E±13 0.0 5123.0 phhco+oh=phco+h2 5.00E±13 0.0 4928.0 phhco+h=c6h6+hco 1.20E±13 0.0 4928.0 phhco+ch5=phco+ch4 2.77E±03 2.8 5773.0 phco+ch5=phco+ch6 7.01E±11 0.0 4400.0 phco+ch5=phco+ch6 7.00E±13 0.0 0.0 phco+ch5=phco+ch2 3.00E±10 0.2870.0 27529.0

2902.	isope+o=isopy+oh	1.74E+11	0.7	5900.0
2903.	isope+h=isopy+h2	2.43E+06	2.3	4300.0
2904.	isope+oh=isopy+h2o	3.00E+06	2.0	-298.0
2905.	isope+ho2=isopy+h2o2	9.60E+03	2.6	13900.0
2906.	isope+ch3=isopy+ch4	6.58E+01	3.2	7173.0
2907.	isopy=>c3h4-a+c2h3	1.27E+16	-0.4	66163.0
2908.	c3h4-a+c2h3=>isopy	1.91E-19	2.0	5976.1
2909.	isopy+h=isope	1.00E+14	0.0	0.0
2910.	isopy+ho2=isopyooh	1.88E+54	-12.9	14900.0
2911.	isopyooh=isopyo+oh	4.47E+45	-9.2	52950.0
2912.	isopyo=ic4h5+ch2o	1.38E+43	-9.4	29520.0
2913.	isopyo=c4h6+hco	1.30E+30	-5.5	25540.0
2914.	c3h5-t+c2h3=isope	1.00E+14	0.0	0.0
2915.	ic4h5+ch3=isope	2.00E+13	0.0	0.0
2916.	isope+h=c3h6+c2h3	1.03E+11	0.9	8671.0
2917.	isope+h=c4h6+ch3	4.94E+36	-6.4	20902.0
2918.	isope+h=c3h5-t+c2h4	4.35E+39	-7.1	28443.0
	Declared duplicate reaction			
2919.	isope+h=c3h5-t+c2h4	4.60E+57	-12.2	47657.0
	Declared duplicate reaction			
2920.	but2mld=c3h5-t+c2h5	3.30E+21	-1.2	97720.0
2921.	but2mld=ic4h7+ch3	1.90E+20	-1.6	75930.0
2922.	but2mld=but2mldm+h	1.00E+15	0.0	84000.0
2923.	but2mld=but2mld3+h	1.00E+15	0.0	84000.0
2924.	but2mld+o2=but2mldm+ho2	5.65E+01	3.6	38513.0
2925.	but2mld+o2=but2mld3+ho2	2.05E+04	2.7	37180.0
2926.	but2mld+h=ic4h8+ch3	7.36E+10	0.4	561.0
2927.	but2mld+h=c3h6+c2h5	7.71E+09	0.9	4841.4
2928.	but2mld+h=c4h8-1+ch3	7.71E+09	0.9	4841.4
2929.	but2mld+h=but2mld3+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
2930.	but2mld+o=but2mld3+oh	8.80E+10	0.7	3250.0
2931.	but2mld+oh=but2mld3+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
2932.	but2mld+ho2=but2mld3+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
2933.	but2mld+ch3=but2mld3+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
2934.	but2mld+h=but2mldm+h2	1.74E+05	2.5	2510.0
2935.	but2mld+o=but2mldm+oh	1.74E+11	0.7	5900.0
2936.	but2mld+oh=but2mldm+h2o	3.00E+06	2.0	-298.0
2937.	but2mld+ho2=but2mldm+h2o2	9.60E+03	2.6	13900.0
2938.	but2mld+ch3=but2mldm+ch4	2.22E+00	3.5	5670.0
2939.	but2mld+h=but2mld4+h2	2.85E+07	2.0	7700.0
2940.	but2mld+o=but2mld4+oh	5.10E+13	0.0	7850.0
2941.	but2mld+oh=but2mld4+h2o	2.67E+06	2.0	450.0
2942.	but2mld+ho2=but2mld4+h2o2	6.00E+11	0.0	17000.0
2943.	but2mld+ch3=but2mld4+ch4	3.00E-01	4.0	8200.0
2944.	but2m2d=c4h722+ch3	6.76E+93	-22.5	137933.0
2945.	but2m2d=ic4h7v+ch3	3.38E+93	-22.5	137933.0
2946.	but2m2d=but2m1d3+h	2.40E+15	0.0	84308.0
2947.	but2m2d=but3m1dt+h	1.92E+15	0.0	83276.0
2948.	but2m2d+o2=but2m1d3+ho2	1.13E+02	3.6	38513.0
2949.	but2m2d+o2=but3m1dt+ho2	5.65E+01	3.6	38513.0
2950.	but2m2d+h=t2c4h8+ch3	2.34E+09	1.2	4823.2
2951.	but2m2d+h=c2c4h8+ch3	2.34E+09	1.2	4823.2
2952	but2m2d+h=ic4h8+ch3	1.56E+10	0.9	2383.8
2953.	but2m2d+oh=ch3coch3+c2h5	1.37E+12	0.0	-1040.0
2954.	but2m2d+o=ch3coch3+c2h4	1.46E+05	2.4	-832.6
2955.	but2m2d+o=tc3h6cho+ch3	9.24E+08	1.2	-238.4
2956.	but2m2d+o=ch3chcoch3+ch3	1.85E+09	1.2	-238.4
2957.	but2m2d+h=but2m1d3+h2	6.82E+04	2.7	3793.1

2958	but2m2d+b=but3m1dt+b2	3 41E+04	27	3793 1					
2959	but 2m2d+o=but 2m1d3+ob	3 48E+11	0.7	5900 0	3016. nc5h12=c5h11-3+h 1.00E+16	0.0	94990.0		
2960	but 2m2d+o=but 3m1dt+oh	1 74E+11	0.7	5900.0	3017. nc5h12=pc4h9+ch3 1.00E+17	0.0	84650.0		
2961	$h_{11} = 2m^2 d + oh = h_{11} = 2m^2 d + h^2 o$	1 05E+05	27	312.8	3018. nc5h12=nc3h7+c2h5 3.16E+17	0.0	87040.0		
2962	but 2m2d+oh=but 3m1dt+b2o	5 27E+04	2.7	312.0	3019. nc5h12+o2=c5h11-1+ho2 3.97E+13	0.0	50870.0		
2963	$h_{11} = 2m^2 d + h_0^2 = h_{11} = 2m^2 d^3 + h^2 c^2$	1 54E+00	4 4	13547 0	3020. nc5h12+o2=c5h11-2+ho2 7.94E+13	0.0	47690.0		
2964	hut 2m2d+ho2=hut 3m1dt+h2o2	7 71E-01	4 4	13547 0	3021. nc5h12+o2=c5h11-3+ho2 3.97E+13	0.0	47690.0		
2965	but 2m2d+cb3=but 2m1d3+cb4	9 08E+01	3 3	7152 0	3022. nc5h12+h=c5h11-1+h2 1.88E+05	2.8	6280.0		
2966	but 2m2d+ch3=but 3m1dt+ch4	4 54E+01	3.3	7152.0	3023. nc5h12+h=c5h11-2+h2 2.60E+06	2.4	4471.0		
2967	but 2m2d+ch3o=but 2m1d3+ch3ob	3 96E+12	0.0	4000 0	3024. nc5h12+h=c5h11-3+h2 1.30E+06	2.4	4471.0		
2968	but 2m2d+ch3o=but 3m1dt+ch3oh	1 98E+12	0.0	4000 0	3025. nc5h12+o=c5h11-1+oh 1.93E+05	2.7	3716.0		
2969	$h_1 + 2m_1 d_4 = c_2h_4 + c_3h_5 - t_4$	2 00E+13	0.0	35400 0	3026. nc5h12+o=c5h11-2+oh 9.54E+04	2.7	2106.0		
2970	hut 2m1d4=isone+h	3 20E+13	0.0	34800 0	3027. nc5h12+o=c5h11-3+oh 4.77E+04	2.7	2106.0		
2971	but 2m1d4+o2=isope+bo2	2 60E+11	0.0	2500.0	3028. nc5h12+oh=c5h11-1+h2o 2.73E+07	1.8	868.4		
2972	but 2m1 dm=c3b4-a+c2b5	2.00E+13	0.0	50000 0	3029. nc5h12+oh=c5h11-2+h2o 1.41E+10	0.9	504.7		
2973	$h_{11} = 2m^2 dm + h_0^2 = ch^2 + c4h^2 + c4$	4 50E+12	0.0	0.0	3030. nc5h12+oh=c5h11-3+h2o 5.72E+06	1.8	-1015.5		
2974	hut 2m1d3=isone+h	3 00E+13	0.0	51500 0	3031. nc5h12+ho2=c5h11-1+h2o2 4.08E+01	3.6	17160.6		
2975	c4h612+ch3=but2m1d3	1 76E+04	2.5	6130 0	3032. nc5h12+ho2=c5h11-2+h2o2 1.26E+02	3.4	13718.9		
2976	$b_{11} + 2m_1 d_3 + o_2 = b_{11} + 2m_1 d_3 o_2$	9 64E+52	-12 8	11220 0	3033. nc5h12+ho2=c5h11-3+h2o2 6.32E+01	3.4	13718.9		
2977	but 2m1d3o2=isope+ho2	7 34E+45	-11 6	33710 0	3034. nc5h12+hco=c5h11-1+ch2o 2.04E+05	2.5	18500.0		
2978	but 2m1d3+o2=isope+bo2	1 10E+05	1 7	5396 0	3035. nc5h12+hco=c5h11-2+ch2o 2.16E+07	1.9	17000.0		
2979	but 2m1d3+bo2=but 2m2d1oob	1 88E+54	-12 9	14900 0	3036. nc5h12+hco=c5h11-3+ch2o 1.08E+07	1.9	17000.0		
2980	but 2m1d3+ho2=but 2m1d3ooh	6 31E+48	-11 2	13610 0	3037. nc5h12+ch3=c5h11-1+ch4 9.04E-01	3.6	7154.0		
2981	but 2m2d1 ooh=but 2m2d1 o+oh	4 47E+45	-9.2	52950 0	3038. nc5h12+ch3=c5h11-2+ch4 5.41E+04	2.3	7287.0		
2982	but 2m1d3ooh=but 2m1d3o+oh	5 68E+40	-7.8	52760 0	3039. nc5h12+ch3=c5h11-3+ch4 2.70E+04	2.3	7287.0		
2983.	but2m1d3+bo2=but2m1d3o+ob	7.67E+20	-2.1	11540.0	3040. nc5h12+ch3o=c5h11-1+ch3oh 2.16E+11	0.0	7000.0		
2984	but 2m1d3+bo2=but 2m2d1o+ob	6 93E+23	-2 9	11560 0	3041. nc5h12+ch30=c5h11-2+ch30h 2.19E+11	0.0	5000.0		
2985	but 2m1d3o=ic3b5cbo+cb3	7 67E+20	-2 1	11540 0	3042. nc5n12+cn30=c5n11-3+cn30n 1.10E+11	0.0	5000.0		
2986.	but 2m2d1o=c4h722+ch2o	1.38E+43	-9.4	29520.0	3043. nc5h12+ch302=c5h11-1+ch302h 1.68E+13	0.0	20440.0		
2987	but 2m2d1o = t2c4h8+hco	1 30E+30	-5 5	28040 0	3044. nc5n12+cn302=C5n11-2+cn302n 1.12E+13	0.0	17690.0		
2988.	$but_2m_2d_1o=c_2c_4h_8+h_co$	1.30E+30	-5.5	29040.0	3045. nc5n12+cn302=c5n11-3+cn302n 5.60E+12	0.0	10000.0		
2989.	$but_2m_2d_1o=sc_3h_5cho+ch_3$	3.65E+30	-5.7	27090.0	3046. hCSh12+C2h3=C5h11-2+C2h4 1.02±+12	0.0	16000.0		
2990.	but.3mldt=isope+h	6.00E+13	0.0	51500.0	3047. ICSIL2TC2IS-CSIL1-2TC2IA 0.00FT1	0.0	16800.0		
2991.	but.3m1dt+o2=isope+ho2	2.20E+05	1.7	5396.0	2040. nc5h12+c2h5-c5h111+c2h6 4.00Ft11	0.0	12400.0		
2992.	but3m1dt+ho2=but2m2d4ooh	1.88E+54	-12.9	14900.0	3049. IICSIII2472/15-c5b11-142/16 1.022471	0.0	10400.0		
2993.	but.3mldt+ho2=but.3mldtooh	6.31E+48	-11.2	13610.0	3050. nc5h12+c2h5=c5h11-2+c2h6 1.00E+10	0.0	10400.0		
2994.	but2m2d4ooh=but2m2d4o+oh	4.47E+45	-9.2	52950.0	3052 c5b11=1=c5b11=2 1 15F+01	3.0	15310 0		
2995.	but.3mldtooh=but.3mldto+oh	5.68E+40	-7.8	52760.0	3052 c5h11=c5h11_2 3 80F-12	6.8	18780 0		
2996.	but3m1dt+ho2=but3m1dto+oh	7.67E+20	-2.1	11540.0	3054 c5b11=1=c2b4+pc3b7 2 00F+13	0.0	28700.0		
2997.	but3m1dt+ho2=but2m2d4o+oh	6.93E+23	-2.9	11560.0	3055 c5h11-1=c5h10-1+b 4 26E+13	0.0	38600.0		
2998.	but2m2d4o=ic4h8+hco	1.30E+30	-5.5	25540.0	3056 c5h11-1+o2=c5h10-1+bo2 8 377=01	3.6	11960 0		
2999.	but3m1dto=c2h3coch3+ch3	1.53E+21	-2.1	11540.0	3057. c5h11-1+oh=c5h10-1+b2o 2.43E+13	0.0	0.0		
3000.	but3mldto=ch3coch3+c2h3	1.38E+43	-9.4	29520.0	3058. c5h11-1+o=ch2o+pc4h9 5.00E+14	0.0	0.0		
3001.	but2m-1=c4h8-1+ch3	2.00E+13	0.0	31000.0	3059 c5h11-1+b=c5h10-1+b2 1 25E+13	0 0	0 0		
3002.	but2m-1=c3h6+c2h5	2.00E+13	0.0	28700.0	3060. c5h11-2=c3h6+c2h5 2.00E+13	0.0	28700.0		
3003.	but2m-2=ic4h8+ch3	2.00E+13	0.0	31000.0	3061. c5h11-2=c5h10-1+h 6.30E+12	0.0	40400.0		
3004.	but2m-3=t2c4h8+ch3	2.67E+13	0.0	31000.0	3062. c5h11-2=c2c5h10+h 5.00E+12	0.0	37900.0		
3005.	but2m-3=c2c4h8+ch3	1.33E+13	0.0	31000.0	3063. c5h11-2=t2c5h10+h 5.00E+12	0.0	37900.0		
3006.	but2m-1=but2m1d+h	1.50E+13	0.0	37500.0	3064. c5h11-3=c4h8-1+ch3 2.00E+13	0.0	31000.0		
3007.	but2m-2=but2m1d+h	6.00E+13	0.0	39000.0	3065. c5h11-3=c2c5h10+h 5.00E+12	0.0	37900.0		
3008.	but2m-2=but2m2d+h	3.00E+13	0.0	38000.0	3066. c5h11-3=t2c5h10+h 5.00E+12	0.0	37900.0		
3009.	but2m-3=but2m2d+h	1.50E+13	0.0	37500.0	3067. c5h11-2+o2=c5h10-1+ho2 5.35E-01	3.7	9322.0		
3010.	but2m-1+o2=but2m1d+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0	3068. c5h11-2+o2=t2c5h10+ho2 5.35E-01	3.7	9322.0		
3011.	but2m-2+o2=but2m1d+ho2	1.38E+12	0.0	5000.0	3069. c5h11-2+o2=c2c5h10+ho2 5.35E-01	3.7	9322.0		
3012.	but2m-2+o2=but2m2d+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	3070. c5h11-3+o2=t2c5h10+ho2 1.07E+00	3.7	9322.0		
3013.	but2m-3+o2=but2m2d+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0	3071. c5h11-3+o2=c2c5h10+ho2 1.07E+00	3.7	9322.0		
3014.	nc5h12=c5h11-1+h	1.58E+16	0.0	97970.0	3072. c5h11-2+ho2=c2c5h10+h2o2 2.40E+13	0.0	0.0		
3015.	nc5h12=c5h11-2+h	1.00E+16	0.0	94990.0	3073. c5h11-2+ho2=t2c5h10+h2o2 2.40E+13	0.0	0.0		
3074.	c5h11-2+ho2=>nc3h7+ch3cho+oh	2.43E+13	0.0	0.0	3130.	t2c5h10+oh=c5h913+h2o	3.38E+13	0.0	3060.0
----------------	---	----------------------	-------------------------	----------	-----------------	--	----------------------	------	---------
3075.	c5h11-2+oh=c5h10-1+h2o	2.40E+13	0.0	0.0	3131.	t2c5h10+oh=c5h924+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
3076.	c5h11-2+oh=c2c5h10+h2o	2.40E+13	0.0	0.0	3132.	t2c5h10+o=c5h913+oh	1.44E+13	0.0	2968.0
3077.	c5h11-2+oh=t2c5h10+h2o	2.40E+13	0.0	0.0	3133.	t2c5h10+o=c5h924+oh	9.62E+12	0.0	1968.0
3078.	c5h11-2+o=nc3h7+ch3cho	5.00E+14	0.0	0.0	.31.34 .	$t_2c_5h_10+c_2c_3c_6+c_3h_6$	1.00E+12	0.0	0.0
3079.	c5h11-2+h=c2c5h10+h2	5.00E+13	0.0	0.0	3135.	$t_{2c5h10+h=c5h913+h2}$	2.92E+13	0.0	5445.0
3080	c5h11-2+h=t2c5h10+h2	5 00E+13	0 0	0 0	3136	$t^2c5h10+h=c5h924+h2$	1 95E+13	0 0	4445 0
3081	$c5h10-1(+m) \le c4h714+ch3(+m)$	6 60E+52	-10 6	100330 0	3137	$t^{2}c^{5}h^{1}0+ch^{3}=c^{5}h^{9}1^{3}+ch^{4}$	2 22E+00	35	5670 0
0001.	Low pressure limit: 0 53400E+18 0 00000E+00	0 42959E+05	10.0	100000.0	31.38	$\pm 2c5h10+ch3=c5h924+ch4$	1 00E+11	0.0	7300 0
	TROE centering: 0.95015E-01 0.10000E-19	0 53476E+0	, 4 0 4 ⁻	3256E+04	3139	$\pm 2c5h10+c2h5=c5h913+c2h6$	1 50E+11	0.0	9000 0
3082	c5h10-1=c2h5+c3h5-a	1 00E+16	0.0	71340 0	3140	$\pm 2c5h10+c2h5=c5h924+c2h6$	1 00E+11	0.0	8000 0
3083	$c_{5h10-1=c_{2h4+c_{3h6}}}$	3 16E+12	0.0	57430 0	3141	$\pm 2c5h10+b=c3h6+c2h5$	3 20E+22	-2.4	11180 0
3084	$c^{2}h^{3}+nc^{3}h^{7}=c^{5}h^{1}h^{-1}$	9 64E+12	0.0	0.0	31/2	$\pm 2c5h10+h=c4h8-1+ch3$	8 80F+16	-1 1	6461 0
3005	$c_{213} + 1c_{311} - c_{3110} + 1$	2 70E+13	0.0	37000 0	3143	c5h013+h=c5h10=1	1 005+13	1.1	0.010
3005.	c5h10-1+o=c5h913+ob	2.70E+13 9.90E+10	0.0	3250 0	3143.	c5h913+h=c2c5h10	1 00E+13	0.0	0.0
2000.	25h10 1/0=25h914/oh	0.00E+10	0.7	5200.0	2145	c5h012+h=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
2007.	c5h10_1+c=c5h915+ch	2.00ETI3	0.0	J200.0	3145.	c5h924 h=c2c5h10	1.00ETI3	0.0	0.0
2000.	c5h10_1+b=c5h012+b2	3.10ETIS	2.0	/030.0	2140.	c5h924+h=c2c5h10	1.00ETI3	0.0	0.0
2009.		3.02E+00	2.2	6JJ.0	3147.		1.00ETI3	0.0	0.0
2001	C5N10-1+N=C5N914+N2	9.00E+06	2.0	5000.0	3148.	C5N915=C3N5-a+C2N4	3.30E+13	1.0	22500.0
3091.	C5n1U-1+n=C5n915+n2	2.85E+07	2.0	//00.0	3149.	C5N915=C5N913	3.34E+U9	1.0	32500.0
3092.	C5n10-1+on=C5n913+n20	2.02E+06	2.2	-437.0	3150.	C5n915+02=C5n814+n02	1.60E+12	0.0	5000.0
3093.	C5h1U-1+oh=C5h914+h2o	2.60E+06	2.0	-//0.0	3151.	C5h915=C5h814+h	2.85E+11	0.3	35520.0
3094.	c5h10-1+oh=c5h915+h2o	2.67E+06	2.0	450.0	3152.	c5h914=c2h3+c3h6	2.00E+13	0.0	35500.0
3095.	c5h10-1+ho2=c5h913+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0	3153.	c5h913=c4h6+ch3	1.30E+13	0.0	38200.0
3096.	c5h10-1+ho2=c5h914+h2o2	4.00E+11	0.0	15500.0	3154.	c5h913=c5h813+h	3.00E+13	0.0	50500.0
3097.	c5h10-1+ho2=c5h915+h2o2	6.00E+11	0.0	17000.0	3155.	c5h913+o2=c5h813+ho2	1.58E+12	0.0	15200.0
3098.	c5h10-1+ch3=c5h913+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0	3156.	c5h913+o2=ch2cho+c2h5cho	1.70E+09	1.0	26400.0
3099.	c5h10-1+ch3=c5h914+ch4	2.00E+11	0.0	9600.0	3157.	c5h913+o2=ch2o+c3h6cho-2	1.70E+09	1.0	26400.0
3100.	c5h10-1+ch3=c5h915+ch4	3.00E-01	4.0	8200.0	3158.	c5h913+ho2=>c2h3cho+c2h5+oh	4.50E+12	0.0	0.0
3101.	c5h10-1+c2h5=c5h913+c2h6	4.40E+00	3.5	4140.0	3159.	c5h913+ho2=>c2h5cho+c2h3+oh	4.50E+12	0.0	0.0
3102.	c5h10-1+h=c3h6+c2h5	4.31E+23	-2.7	9830.2	3160.	c5h913+h=c5h813+h2	3.16E+13	0.0	0.0
3103.	c5h10-1+h=c2h4+nc3h7	3.25E+22	-2.5	11048.4	3161.	c5h913+ch3=c5h813+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
3104.	c2c5h10=t2c5h10	1.86E+14	0.0	63501.0	3162.	c5h913+c2h3=c5h813+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
3105.	c2c5h10=c4h713+ch3	1.00E+16	0.0	81000.0	3163.	c5h913+c2h5=c5h813+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
3106.	c2c5h10+o2=c5h913+ho2	2.70E+13	0.0	37000.0	3164.	c5h913+c3h5-a=c5h813+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
3107.	c2c5h10+o2=c5h924+ho2	2.70E+13	0.0	37000.0	3165.	c5h913+c4h713=c5h813+c4h8-1	3.16E+12	0.0	0.0
3108.	c2c5h10+ho2=c5h913+h2o2	1.47E+11	0.0	14962.0	3166.	c5h913+o=c2h3cho+c2h5	6.03E+13	0.0	0.0
3109.	c2c5h10+ho2=c5h924+h2o2	9.80E+10	0.0	12583.0	3167.	c5h924=c5h813+h	3.00E+13	0.0	51500.0
3110.	c2c5h10+ho2=>ch3cho+c3h6+oh	5.01E+11	0.0	12068.0	3168.	c5h924+o2=c5h813+ho2	1.58E+12	0.0	15200.0
3111.	c2c5h10+oh=c5h913+h2o	3.38E+13	0.0	3060.0	3169.	c5h924+o2=ch3chcho+ch3cho	1.70E+09	1.0	26400.0
3112.	c2c5h10+oh=c5h924+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0	3170.	c5h924+o=sc3h5cho+ch3	6.03E+13	0.0	0.0
3113.	c2c5h10+o=c5h913+oh	1.44E+13	0.0	2968.0	3171.	nc4h5+ch3=c5h813	2.00E+13	0.0	0.0
3114.	c2c5h10+o=c5h924+oh	9.62E+12	0.0	1968.0	3172.	c3h5-s+c2h3=c5h813	5.00E+13	0.0	0.0
3115.	c2c5h10+o=ch3cho+c3h6	1.00E+12	0.0	0.0	3173.	c3h5-a+c2h3=c5h814	1.00E+13	0.0	0.0
3116.	c2c5h10+h=c5h913+h2	2.92E+13	0.0	5445.0	3174.	c5h813+ho2=>c2h3cho+c2h4+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
3117	$c^2c5h10+h=c5h924+h2$	1 95E+13	0 0	4445 0	3175	c5h813+ho2=>c4h6+ch2o+oh	5 00E+11	0 0	19000 0
3118	$c^2c^{5h10+ch3}=c^{5h913+ch4}$	2 22E+00	35	5670 0	3176	c5h813+oh=ch3cho+c3h5-a	1 37E+12	0.0	-1040 0
3119	$c_2c_5h_10+c_h3=c_5h_924+c_h4$	1 00E+11	0.0	7300 0	3177	c5h813+oh=c2b5+c2b3cbo	1 37E+12	0.0	-1040 0
3120	$c^2c^{5h10+c^{2h5}=c^{5h91}3+c^{2h6}}$	1 50E+11	0.0	9000.0	3178	c5h813+oh=ch3cho+c3h5-s	1 37E+12	0.0	-1040 0
3121	$c^2c5h10+c2h5=c5h924+c2h6$	1 005+11	0.0	8000.0	3179	c5h813+ch=ch2c+c4h713	1 37E+12	0.0	-1040.0
3122	$c^2c^{5h10+b=c^{3h6+c^{2h5}}}$	3 20E+22	-2 4	11180 0	31.75. 31.80	c5h813+c=c2h3chc+c2h4	4 50E+08	1 4	-858 0
3123	$c^2c^{5h10+h=c4h8-1+ch3}$	8 80E+16	-1 1	6461 0	3101	c5h813+c=ch2c+c4h6	1.50E+00 4.50E±00	1 /	-858 0
3124	+2c5h10-c4b713+cb3	1 005+16	1.1	91000 0	JI01.	a5h913th = a3h5 = a4a2h4	3 350-00	1 5	2000.0
3105	$t_{2}c_{3}i_{1}v_{-}c_{4}i_{1}/t_{3}\tau_{0}i_{3}$	2 705:12	0.0	37000.0	3182.	$c_{310}c_{3+11}=c_{311}c_{31$	3.3JE+U8 1 7/E+OF	1.0	2000.0
3106	$t_{2}c_{5}h_{1}0t_{0}2-c_{5}h_{2}02$	2.70ET13 2.70E:12	0.0	37000.0	3103.	$c5h013\pm cb=c5h7\pm b2c$	1./45+05	2.0	2010.0
J⊥∠0. 21.27	$t_2 = 0$	2./UE+13 1.47E+11	0.0	14062 0	3184.	c5h012lo=c5h7loh	3.UUE+U6 1.74m+11	2.0	-298.0
J⊥Z/. 21.20	$t_2 = 5h_1 0 + h_2 = 25h_1 2 + h_2 = 2$	1.4/D+11	0.0	12502.0	3183.	c5H013+bc2=c5h7+b2c2	1./48+11	0.1	12000.0
J⊥∠ð. 21.20		9.00L+10	0.0	12000.0	3186.	CJII013TII0Z=CJII/TII20Z	9.0UL+U3	2.0	13900.0
3129.	LZCJHIU+HOZ=ZCHJCHO+CJH0+ON	J.UIE+II	υ.υ	1∠U68.U	318/.	COHOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTOTO	Z.ZZE+UU	3.3	J0.U.0C

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=pentcv1o2+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=pentcv1o5+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+ch2o	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=>ch3chco+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.	pentcylo4+ho2=>ch3coch2+c2h4+h2o2	5.00E+12	0.0	17700.0
3217.	pentlo2h2j+o2=pentlo2h2o2	1.57E+14	-0.8	-536.5	3275.	pentcy1o5+ho2=>pc2h4cho+c2h4+h2o2	5.00E+12	0.0	17700.0
3218.	pentlo2h3j+o2=pentlo2h3o2	1.57E+14	-0.8	-536.5	3276.	pentcy1o5+ho2=>ch2o+c4h713+h2o2	5.00E+12	0.0	17700.0
3219.	pentlo2h4j+o2=pentlo2h4o2	1.57E+14	-0.8	-536.5	3277.	pentcy2o3+ho2=>ch3chco+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.	pentlo2h2j=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.	pentlo2h2o2=pent2o2h1*o+oh	2.44E+0/	1.6	27900.0	3285.	pent2o2h3j=t2c5h10+ho2	2.2/E+10	0.8	15100.0
3228.	pentlo2h3o2=pent3o2h1*o+oh	1.10E+04	2.4	19900.0	3286.	pent3o2h2j=t2c5h10+ho2	2.03E+10	0./	15034.0
3229.	pentlo2h4o2=pent4o2h1*o+oh	1.26E+03	2.2	17400.0	3287.	pentlo2h2j=>c2h5+c3h5-aooh	2.41E+10	1.0	28200.0
3230.	pentlo2h5o2=pent5o2h1*o+oh	1.12E+03	1.8	16600.0	3288.	pent1o2h3j=>c4h8-1+ch2o+oh	9.10E+08	1.4	25500.0
3231.	pent202n102=pent102n2*0+0n	2.76E+U8	1.2	25700.0	3289.	pentlo2n4j=>c3n6+c2n4o2n	5.U8E+11	0.7	28700.0
3232.	pent202n302=pent302n2*0+0n	1.75E+08	1./	26000.0	3290.	pent2o2n4j=>c3n6+cn3cno+on	1.18E+U9	1.2	22700.0
3233.	pent202n402=pent402n2*0+0n	1./5E+U2	3.1	1500.0	3291.	pent2o2n5j => c2n4+proon2-1	0.80E+13	1 7	29000.0
3234.	pent2o2h5o2=pent5o2h2*o+oh	5.77E+02	2.2	17000.0	3292.	pent302n1j=>c2n4+c2n5cn0+on	3.10E+18 7.00E+12	-1.7	26820.0
3233.	pent302n102=pent102n3^0+0n	5.79E+UI	2.9	17000.0	3293.	pentio2+c5nii-i=pentio+pentio	7.00E+12 7.00E+12	0.0	-1000.0
3230.	pent302n202=pent202n3^0+0n	1./5E+U8	1.7	20000.0	32.94.	pentio2+c5h11-2-pentio+pent20	7.00E+12 7.00E+12	0.0	-1000.0
3237.	$pent202n1^0 = 2nc0+nc3n/cn0+on$	2.50E+15	0.0	43000.0	3293.	pent102+CSH11=3-pent10+pent30	7.00E+12 7.00E+12	0.0	-1000.0
2220.	pent302h1*0=2ch2ch0+c2h3ch0+oh	2.JUETIJ 2.EOEI1E	0.0	43000.0	32,30.	pent2o2+c5h11_1_pent2o+pent1o	7.00E+12 7.00E+12	0.0	-1000.0
3239.	pent402n1=0=2pc2n4Cn0+Cn3Cn0+On	2.JUETIJ 2.50EL15	0.0	43000.0	3297.	penc202+c5h11=2-penc20+penc20	7.005+12	0.0	-1000.0
3240.	pentulation = 2content = 4+CH2O+OH	2.JUETIJ 2.50E+15	0.0	43000.0	3298.	pent202+c5h11=3-pent20+pent30	7 005+12	0.0	-1000.0
3241.	pent 3o2h2 = b ch3co+ch2cho+oh	2.508+15	0.0	43000.0	3300	pent3o2+c5h11=2=pent3o+pent2o	7 005+12	0.0	-1000.0
3242.	pent4o2h2 = ch3coch2+ch3cho+oh	2.50E+15	0.0	43000.0	3300.	pent3o2+c5h11=3=pent3o+pent2o	7 00E+12	0.0	-1000.0
3243.	pent 5o2h2 = ch3coch2 + ch3ch0 + oh	2.50E+15	0.0	43000.0	3301.	c5h11-1+ho2=pent10+oh	7 00E+12	0.0	-1000.0
3245	pent1o2h2*o=>c2h5coch2+ch2o+oh	2 50E+15	0.0	43000.0	3302.	$c_{11} - 2 + h_{0} = pent 20 + 0h$	7 00E+12	0.0	-1000.0
J24J.	penerozno o-zeznococnz (chzoron	2.306713	0.0	-3000.0	5505.	CONTE FUNCE PONCEO CON	,.000112	0.0	1000.0

3304.	c5h11-3+ho2=pent3o+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0	3362.	. c5h11cho+ch3o=c5h11co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
3305.	pent1o2+ch3=pent1o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3363.	. c5h11cho+ch3o2=c5h11co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
3306.	pent2o2+ch3=pent2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3364.	. c5h11cho+oh=c5h10cho-6+h2o	5.27E+09	1.0	1586.0
3307.	pent3o2+ch3=pent3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3365.	. c5h11cho+oh=c5h10cho-5+h2o	4.67E+07	1.6	-35.0
3308.	c5h11-1+ch3o2=pent1o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3366.	c5h11cho+oh=c5h10cho-4+h2o	4.67E+07	1.6	-35.0
3309.	c5h11-2+ch3o2=pent2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3367.	c5h11cho+oh=c5h10cho-3+h2o	4.67E+07	1.6	-35.0
3310.	c5h11-3+ch3o2=pent3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3368.	. c5h11cho+oh=c5h10cho-2+h2o	2.70E+09	1.0	-149.0
3311.	pent1o2+h2o2=pent1o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0	3369.	. c5h11cho+ho2=c5h10cho-6+h2o2	9.03E-01	3.6	7153.0
3312.	pent1o2+ho2=pent1o2h+o2	2.11E+10	0.0	-3640.0	3370.	. c5h11cho+ho2=c5h10cho-5+h2o2	1.48E+04	2.6	13910.0
3313.	pent1o2+ho2=>pent1o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3371.	. c5h11cho+ho2=c5h10cho-4+h2o2	1.48E+04	2.6	13910.0
3314.	pent1o2+ch3o2=>pent1o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3372.	. c5h11cho+ho2=c5h10cho-3+h2o2	1.48E+04	2.6	13910.0
3315.	pent1o2+pent1o2=>pent1o+pent1o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3373.	. c5h11cho+ho2=c5h10cho-2+h2o2	3.61E+03	2.5	10530.0
3316.	pent1o2h=pent1o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0	3374.	. c5h11cho+ch3o2=c5h10cho-6+ch3o2h	6.03E+12	0.0	19380.0
3317.	pent2o2+h2o2=pent2o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0	3375.	. c5h11cho+ch3o2=c5h10cho-5+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
3318.	pent2o2+ho2=pent2o2h+o2	2.11E+10	0.0	-3640.0	3376.	. c5h11cho+ch3o2=c5h10cho-4+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
3319.	pent2o2+ho2=>pent2o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3377.	. c5h11cho+ch3o2=c5h10cho-3+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
3320.	pent2o2+ch3o2=>pent2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3378.	. c5h11cho+ch3o2=c5h10cho-2+ch3o2h	9.63E+03	2.6	11510.0
3321.	pent2o2+pent1o2=>pent2o+pent1o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3379.	. c5h11co=>c5h11-1+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
3322.	pent2o2+pent2o2=>pent2o+pent2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3380.	c5h10cho-2=c2h3cho+nc3h7	7.40E+11	0.0	21970.0
3323.	pent2o2h=pent2o+oh	9.45E+15	0.0	41600.0	3381.	c5h10cho-3=c5h10-1+hco	8.25E+12	-0.2	21900.0
3324.	pent3o2+h2o2=pent3o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0	3382.	c5h10cho-3=c2h5+ac3h5cho	2.00E+13	0.0	28700.0
3325.	pent3o2+ho2=pent3o2h+o2	2.11E+10	0.0	-3640.0	3383.	. c5h10cho-4=c4h8-1+ch2cho	7.40E+11	0.0	21970.0
3326.	pent3o2+ho2=>pent3o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3384.	c5h10cho-5=c3h6+pc2h4cho	7.40E+11	0.0	21970.0
3327.	pent3o2+ch3o2=>pent3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3385.	. c5h10cho-6=c2h4+c3h6cho-4	7.40E+11	0.0	21970.0
3328.	pent3o2+pent1o2=>pent3o+pent1o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3386.	nc6h14=c6h13-1+h	1.58E+16	0.0	97970.0
3329.	pent3o2+pent2o2=>pent3o+pent2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3387.	nc6h14=c6h13-2+h	1.00E+16	0.0	94990.0
3330.	pent3o2+pent3o2=>pent3o+pent3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3388.	nc6h14=c6h13-3+h	1.00E+16	0.0	94990.0
3331.	pent3o2h=pent3o+oh	9.45E+15	0.0	41600.0	3389.	nc6h14=ch3+c5h11-1	7.90E+22	-1.8	88630.0
3332.	pent3o=c2h5cho+c2h5	2.00E+13	0.0	20000.0	3390.	nc6h14=c2h5+pc4h9	3.16E+17	0.0	87040.0
3333.	c5ald4oxo+o2=mecoetco+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0	3391.	nc6h14=nc3h7+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040.0
3334.	c5ald4oxo+oh=mecoetco+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0	3392	nc6h14+o2=c6h13-1+ho2	3.97E+13	0.0	50870.0
3335.	c5ald4oxo+h=mecoetco+h2	4.00E+13	0.0	4200.0	3393.	nc6h14+o2=c6h13-2+ho2	7.94E+13	0.0	47690.0
3336.	c5ald4oxo+o=mecoetco+oh	5.00E+12	0.0	1790.0	3394	nc6h14+o2=c6h13-3+ho2	7.94E+13	0.0	47690.0
3337.	c5ald4oxo+ho2=mecoetco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0	3395.	nc6h14+h=c6h13-1+h2	1.88E+05	2.8	6280.0
3338.	c5ald4oxo+ch3o=mecoetco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0	3396.	nc6h14+h=c6h13-2+h2	2.60E+06	2.4	4471.0
3339.	c5ald4oxo+ch3o2=mecoet.co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0	3397	nc6h14+h=c6h13-3+h2	2.60E+06	2.4	4471.0
3340.	mecoetco=>acetoch2+co	1.83E+15	-0.7	12910.0	3398.	nc6h14+o=c6h13-1+oh	1.93E+05	2.7	3716.0
3341.	c5ald3oxo+o2=et.comeco+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0	3399	nc6h14+o=c6h13-2+oh	9.54E+04	2.7	2106.0
3342.	c5ald3oxo+oh=etcomeco+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0	3400.	nc6h14+o=c6h13-3+oh	9.54E+04	2.7	2106.0
3343.	c5ald3oxo+h=etcomeco+h2	4.00E+13	0.0	4200.0	3401.	nc6h14+oh=c6h13-1+h2o	2.73E+07	1.8	868.0
3344.	c5ald3oxo+o=etcomeco+oh	5.00E+12	0.0	1790.0	3402.	nc6h14+oh=c6h13-2+h2o	1.41E+10	0.9	505.0
3345.	c5ald3oxo+ho2=etcomeco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0	3403.	nc6h14+oh=c6h13-3+h2o	1.14E+07	1.8	-1015.0
3346.	c5ald3oxo+ch3o=etcomeco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0	3404.	nc6h14+ho2=c6h13-1+h2o2	1.68E+13	0.0	20440.0
3347.	c5ald3oxo+ch3o2=etcomeco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0	3405.	nc6h14+ho2=c6h13-2+h2o2	1.12E+13	0.0	17690.0
3348.	etcomeco=>c2h5coch2+co	1.83E+15	-0.7	12910.0	3406.	nc6h14+ho2=c6h13-3+h2o2	1.12E+13	0.0	17690.0
3349.	c5ald2oxo+o2=prcoco+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0	3407.	. nc6h14+hco=c6h13-1+ch2o	2.04E+05	2.5	18500.0
3350.	c5ald2oxo+oh=prcoco+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0	3408.	. nc6h14+hco=c6h13-2+ch2o	2.16E+07	1.9	17000.0
3351.	c5ald2oxo+h=prcoco+h2	4.00E+13	0.0	4200.0	3409.	. nc6h14+hco=c6h13-3+ch2o	2.16E+07	1.9	17000.0
3352.	c5ald2oxo+o=prcoco+oh	5.00E+12	0.0	1790.0	3410.	nc6h14+ch3=c6h13-1+ch4	9.04E-01	3.6	7154.0
3353.	c5ald2oxo+ho2=prcoco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0	3411.	nc6h14+ch3=c6h13-2+ch4	5.41E+04	2.3	7287.0
3354.	c5ald2oxo+ch3o=prcoco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0	3412.	. nc6h14+ch3=c6h13-3+ch4	5.41E+04	2.3	7287.0
3355.	c5ald2oxo+ch3o2=prcoco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0	3413.	. nc6h14+ch3o=c6h13-1+ch3oh	3.16E+11	0.0	7000.0
3356.	prcoco=>nc3h7co+co	1.83E+15	-0.7	12910.0	3414.	. nc6h14+ch3o=c6h13-2+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000.0
3357.	- c5h11cho+oh=c5h11co+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0	3415.	. nc6h14+ch3o=c6h13-3+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000.0
3358.	c5h1lcho+h=c5h1lco+h2	4.00E+13	0.0	4200.0	3416.	. nc6h14+ch3o2=c6h13-1+ch3o2h	1.68E+13	0.0	20440.0
3359.	c5h1lcho+o=c5h1lco+oh	5.00E+12	0.0	1790.0	3417.	. nc6h14+ch3o2=c6h13-2+ch3o2h	1.12E+13	0.0	17690.0
3360.	c5h11cho+ho2=c5h11co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0	3418.	. nc6h14+ch3o2=c6h13-3+ch3o2h	1.12E+13	0.0	17690.0
3361.	c5h11cho+ch3=c5h11co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0	3419.	. nc6h14+c2h3=c6h13-1+c2h4	1.02E+12	0.0	18000.0

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=ch3cho+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	1.95E+13	0.0	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=ch3+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	4.00E+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

3594	c6h9136=>nc4h5+c2h4	6 03E+13	03	41502 0	
3595	$c_{3b5-a+c_{3b5-a=c_{b1}014}}$	1 00F+14	0.0	0.0	
3596	$n_{c}^{c}h_{1}^{1}+h_{e}^{1}n_{2}^{2}=ch_{1}^{2}h_{1}^{2}+h_{e}^{1}n_{2}^{2}h_{1}^{2}$	5 60F+12	0.0	20440 0	
2507	nconit+inexi02=conit5 itinexi02n	2 720112	0.0	17600 0	
3597.	n = Ch 14 + h = x 102 - Ch 12 + h = x 102h	3.73ETIZ	0.0	17090.0	
3598.	nc6n14+nex102=c6n13-3+nex102n	3./3E+12	0.0	1/690.0	
3599.	nc6n14+nex202=c6n13-1+nex202n	5.60E+12	0.0	20440.0	
3600.	nc6h14+hex2o2=c6h13-2+hex2o2h	3.73E+12	0.0	17690.0	
3601.	nc6h14+hex2o2=c6h13-3+hex2o2h	3.73E+12	0.0	17690.0	
3602.	nc6h14+hex3o2=c6h13-1+hex3o2h	5.60E+12	0.0	20440.0	
3603.	nc6h14+hex3o2=c6h13-2+hex3o2h	3.73E+12	0.0	17690.0	
3604.	nc6h14+hex3o2=c6h13-3+hex3o2h	3.73E+12	0.0	17690.0	
3605.	c6h13-1+o2=hex1o2	4.82E+36	-8.2	5170.0	
3606.	c6h13-2+o2=hex2o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3607.	c6h13-3+o2=hex3o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3608.	hex1o2=c6h12-1+ho2	1.26E+08	1.4	26900.0	
3609.	hex2o2=c6h12-1+ho2	2.40E+09	1.1	28400.0	
3610.	hex2o2=c6h12-2+ho2	3.40E+10	0.7	28700.0	
	Declared duplicate reaction				
3611	hex2o2=c6h12-2+ho2	1 45E+10	0.8	27900 0	
0011.	Declared duplicate reaction	1.102.10	0.0	27500.0	
3612	bev3a2=c6h12=2+ba2	3 405+10	0 7	28700 0	
5012.	Declared duplicate reaction	3.406+10	0.7	20700.0	
2612	beriared dupitcate reaction	1 450110	0 0	27000 0	
3013.	nex302=c6n12-2+n02	1.456+10	0.8	2/900.0	
0.61.4	Declared duplicate reaction	0.407.10	0 7	00700 0	
3614.	hex3o2=c6h12-3+ho2	3.40E+10	0./	28/00.0	
	Declared duplicate reaction				
3615.	hex3o2=c6h12-3+ho2	1.45E+10	0.8	27900.0	
	Declared duplicate reaction				
3616.	hex1o2=c5h11cho+oh	6.50E+04	2.5	36500.0	
3617.	hex1o2=hex1o2h2j	9.55E+07	1.4	28600.0	
3618.	hex1o2=hex1o2h3j	9.30E+07	1.1	18200.0	
3619.	hex1o2=hex1o2h4j	1.03E+06	1.4	16400.0	
3620.	hex1o2=hex1o2h5j	1.03E+05	1.4	16200.0	
3621.	hex2o2=hex2o2h1j	4.34E+06	1.7	32000.0	
3622.	hex2o2=hex2o2h3j	9.55E+07	1.4	28600.0	
3623.	hex2o2=hex2o2h4j	9.30E+07	1.1	18200.0	
3624.	hex2o2=hex2o2h5j	1.03E+06	1.4	16400.0	
3625	hex3o2=hex3o2h1i	4 86E+07	1 2	21500 0	
3626	hex3o2=hex3o2h2i	9 55E+07	1 4	28600 0	
3627	hex3o2=nprcoet+ob	4 87E+05	2 2	35100 0	
3628	hex3o2=hpredet.on	9 55E+07	1 4	28600.0	
2620.	hew2o2=hew4o2h2j	0.300107	1 1	10200.0	
2029.	hex302=hex402h2]	9.30ET07	1.1	10200.0	
3630.	nex302=nex402n1]	1.03E+06	11 1	20200.0	
3631.	nex102n2j+02=nex102n202	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3632.	hexlo2h3j+o2=hexlo2h3o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3633.	hex1o2h4j+o2=hex1o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3634.	hex1o2h5j+o2=hex1o2h5o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3635.	hex2o2h1j+o2=hex2o2h1o2	4.82E+36	-8.2	5170.0	
3636.	hex2o2h3j+o2=hex2o2h3o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3637.	hex2o2h4j+o2=hex2o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3638.	hex2o2h5j+o2=hex2o2h5o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3639.	hex3o2h1j+o2=hex3o2h1o2	4.82E+36	-8.2	5170.0	
3640.	hex3o2h2j+o2=hex3o2h2o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3641.	hex3o2h4j+o2=hex3o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3642.	hex4o2h2j+o2=hex4o2h2o2	1.84E+45	-11.1	6540.0	
3643.	hex4o2h1j+o2=hex4o2h1o2	4.82E+36	-8.2	5170.0	
3644.	hex1o2h2o2=>hex2o2h1*o+oh	9.56E+07	1.4	26600.0	
3645	hex1o2h2o2=>hex1o2h2*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0	

3646.	hex1o2h3o2=>hex3o2h1*o+oh	9.30E+07	1.1	16200.0
3647.	hex1o2h3o2=>hex1o2h3*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0
3648.	hex1o2h4o2=>hex4o2h1*o+oh	1.03E+06	1.4	14400.0
3649.	hex1o2h4o2=>hex1o2h4*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0
3650.	hex1o2h5o2=>hex5o2h1*o+oh	1.03E+05	1.4	14200.0
3651.	hex2o2h1o2=>hex1o2h2*o+oh	9.56E+07	1.4	26600.0
3652.	hex2o2h1o2=>hex2o2h1*o+oh	6.50E+04	2.5	36500.0
3653.	hex2o2h3o2=>hex3o2h2*o+oh	2.52E+07	1.4	23300.0
3654.	hex2o2h3o2=>hex2o2h3*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0
3655.	hex2o2h4o2=>hex4o2h2*o+oh	1.45E+08	0.9	13800.0
3656.	hex2o2h4o2=>hex2o2h4*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0
3657.	hex2o2h5o2=>hex5o2h2*o+oh	2.02E+07	0.9	12600.0
3658.	hex3o2h2o2=>hex2o2h3*o+oh	2.52E+07	1.4	23300.0
3659.	hex3o2h2o2=>hex3o2h2*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0
3660.	hex3o2h4o2=>hex4o2h3*o+oh	2.52E+07	1.4	23300.0
	Declared duplicate reaction			
3661.	hex3o2h4o2=>hex4o2h3*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0
	Declared duplicate reaction			
3662.	hex3o2h1o2=>hex1o2h3*o+oh	1.45E+08	0.9	13800.0
3663.	hex3o2h1o2=>hex3o2h1*o+oh	6.50E+04	2.5	36500.0
3664.	hex4o2h2o2=>hex2o2h4*o+oh	1.45E+08	0.9	13800.0
3665.	hex4o2h2o2=>hex4o2h2*o+oh	4.87E+05	2.2	35100.0
3666.	hex4o2h1o2=>hex1o2h4*o+oh	2.02E+07	0.9	12600.0
3667.	hex4o2h1o2=>hex4o2h1*o+oh	6.50E+04	2.5	36500.0
3668.	hex2o2h1*o=>nc4h9cho+hco+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3669.	hex3o2h1*o=>nc3h7cho+ch2cho+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3670.	hex4o2h1*o=>c2h5cho+pc2h4cho+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3671.	hex5o2h1*o=>ch3cho+c3h6cho-4+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3672.	hex1o2h2*o=>nc4h9co+ch2o+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3673.	hex3o2h2*o=>nc3h7cho+ch3co+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3674.	hex4o2h2*o=>c2h5cho+ch3coch2+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3675.	hex5o2h2*o=>ch3cho+acetoch2+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3676.	hex1o2h3*o=>nc3h7coch2+ch2o+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3677.	hex2o2h3*o=>nc3h7co+ch3cho+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3678.	hex4o2h3*o=>c2h5cho+c2h5co+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3679.	hexlo2h4*o=>prcoch3-1+ch2o+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3680.	hex2o2h4*o=>c2h5coch2+ch3cho+oh	6.00E+14	0.0	42330.0
3681.	hex1o2h3j=>hexcy3o1+oh	8.45E+08	0.9	15300.0
3682.	hexlo2h4j=>hexcy4o1+oh	2.42E+07	1.0	8300.0
3683.	hex2o2h4j=>hexcy4o2+oh	1.38E+09	0.7	15200.0
3684.	hex2o2h5j=>hexcy5o2+oh	2.42E+07	1.0	8300.0
3685.	hex3o2h1j=>hexcy3o1+oh	2.20E+0/	1.6	16000.0
3686.	hex4o2h1j=>hexcy4o1+oh	2.48E+09	0.3	11200.0
3687.	hex4o2h2j=>hexcy4o2+oh	1.38E+09	0.7	15200.0
3688.	hexcy5o2+h=>ch3coch2+c3h6+h2	9.60E+08	1.5	2005.0
3689.	hexcy5o2+oh=>ch3coch2+c3h6+h2o	4.80E+06	2.0	-1192.0
3690.	hexcy5o2+ho2=>ch3coch2+c3h6+h2o2	8.00E+12	0.0	13260.0
3691.	hexcy401+h=>ch2cho+c4h8-1+h2	9.60E+08	1.5	2785.0
3692.	hexcy401+h=>c2h5coch2+c2h4+h2	4.80E+08	1.5	2005.0
3693.	hexcy401+oh=>ch2ch0+c4h8-1+h2o	4.80E+06	2.0	-1192.0
3694.	nexcy401+on=>c2n5cocn2+c2n4+n2o	2.40E+06	2.0	-1192.0
3695.	hexcy401+ho2=>ch2cho+c4h8-1+h2o2	8.00E+12	0.0	14400.0
3696.	nexcy401+no2=>c2h5coch2+c2h4+h2o2	4.UUE+12	0.0	13260.0
3697.	nexcy402+n=>ch3c0+c4h8-1+h2	4.805+08	1.5	2005.0
2098.	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}$	4.8UE+U8	1.5	2005.0
2099.	$\frac{1}{10000000000000000000000000000000000$	2.4UE+U6	2.0	-1192.0
3700.	nexcy402+0n=>c2n5c0+c3n6+n20	2.4UE+U6	2.0	-1192.0
∍/UI.	nexcy402+noz=>cn3co+c4n8-1+n202	4.005+12	0.0	13200.0

315.1 https://dot/dot/dot/dot/dot/dot/dot/dot/dot/do	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
310.1 backgobi law with over 201 law 2	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
305. Augrysia-bachecksholl (-:-bub) 305. Augrysia-bachecksholl (-:-bub) 1.4448.1.2 305. Margysia-bachecksholl (-:-bub) 1.4448.1.2 0.4448.1.2 0.4448.1.2 306. Margysia-bachecksholl (-:-bub) 1.4448.1.2 0.4448.1.2 0.4448.1.2 307. Margysia-bachecksholl (-:-bub) 2.4448.1.3 0.0 1.4448.1.2 307. Margysia-bachecksholl (-:-bub) 2.4448.1.3 0.0 1.4448.1.2 307. Margysia-bachecksholl (-:-bub) 2.4448.1.3 0.0 0.0 1.4448.1.2 307.1. Margysia-bachecksholl (-:-bub) 2.4448.1.3 0.0 0.0 0.0 307.1. Margysia-bachecksholl (-:-bub) 1.4448.1.2 0.0 0.0 0.0 307.1. Margysia-bachecksholl (-:bub)	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
3016. hardyoin theorem (1)	3705.	hexcy3o1+oh=>hco+c5h10-1+h2o	4.80E+06	2.0	-1192.0	3763.	hex2o=ch3+nc4h9cho	1.78E+13	0.0	14890.0
3777. sextgorthola-shoethold-hedg 2,247471 0.0 12400.5 3764. sextgorthola-shoethold 2,147471 0.0 12400.5 3764. sextgorthold-shoethold 2,14747 0.0 1398.0 0.0 3764. sextgorthold-shoethold 1,4024.5 0.4 4400.5 3713. sextgorthold-shoethold-shoethold 1,4024.5 1.4 0.0 0.0 3764. sextgorthold-shoethold-shoethold 1,4024.5 -1.6 0.6 0.0 3764. sextgorthold-shoethold-shoethold 1,4024.5 -1.6 0.6 0.0 3764. sextgorthold-shoethold	3706.	hexcy3o1+oh=>nc3h7co+c2h4+h2o	2.40E+06	2.0	-1192.0	3764.	hex2o=ch3cho+pc4h9	5.25E+13	0.0	11690.0
3786. margylak huderwatelkenka 2.4484.2 0.0 9956. 9876. margylak huderwatelkenka 2.4484.3 0.0 9956. 9876. margylak huderwatelkenka 2.4484.3 0.0 0.0 9956. 9871. margylak huderwatelkenka 2.4484.3 0.0 0.0 3770. margylak huderwatelkenka 2.4484.4 0.0 0.0 9711. margylak huderwatelkenka 2.4484.3 0.0 0.0 3770. margylak huderwatelkenka 2.4484.4 0.0 0.0 9711. margylak huderwatelkenka 2.4484.3 0.0 0.0 3770. margylak huderwatelkenka 2.4484.4 0.0 0.0 9715. margylak huderwatelkenka 2.4484.3 0.0 <td>3707.</td> <td>hexcy3o1+ho2=>hco+c5h10-1+h2o2</td> <td>8.00E+12</td> <td>0.0</td> <td>14400.0</td> <td>3765.</td> <td>hex3o2+ho2=hex3o2h+o2</td> <td>2.29E+11</td> <td>0.0</td> <td>-1790.0</td>	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
3799. ofbl3-tho2-ofbl3-th22 2.418-13 0.0 0.0 3764. heb/2hr/s04-ofbl2 1.644 1.4 1.640.0 10. ofbl3-th02-ofbl2-th22 2.418-11 0.0 0.0 3774. heb/2th23-th22-ofbl2 2.418-11 0.0 1000.0 3774. heb/2th23-th23-th22-ofbl2 2.418-11 0.0 1000.0 3774. heb/2th23-th23-th22-ofbl2 2.418-11 0.0 1000.0 3774. heb/2th23-th23-th23-th23-th23-th23-th23-th23	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
310. 0.013-2+h02-0h12-1+h022 2.418+3 0.0 0.0 3164. hex30=h02-h030 1.468+1 -1.6 1860. 311. oh11-4-h12-4h22 2.418+13 0.0 0.0 3164. hex30=h12-4h230 2.418+10 0.0 0.0 311. oh11-4-h12-h12-h122 2.418+13 0.0 0.0 317. hex30=h12-4h22 2.418+10 0.0 0.0 311. oh11-4-h12-h122-h122 2.418+13 0.0 0.0 317. hex30=h12-h122-h122 2.418+10 0.0 0.0 311. oh11-4-h12-h122-h122 2.418+10 0.0 0.0 317. hex30=h12-h122-h122-h122 2.418+10 0.0 0.0 311. oh11-4-h12-h122-h122 7.478+03 2.3 11080.0 377. hex30=h12-h127-h120 3.128+13 0.0 1.699.0 311. oh11-4-h12-h122-h122 7.478+03 2.3 11080.0 377. hex30=h127-h120 3.268+13 0.0 1.689.0 311. oh11-4-h12-h122-h122 7.478+03 2.3 11080.0 377. hex30=h127-h120 3.268+13 0.0 1.689.0 311. oh11-4-h12-h122-h122 0.0 377. hex30=h127-h120 3.268+12 0.0 4.439.0 4.439.0 4.439.0 4.439.0<	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
311. of dials-2+thod-offils-2+thod $1.492-14$ <td>3710.</td> <td>c6h13-2+ho2=c6h12-1+h2o2</td> <td>2.41E+13</td> <td>0.0</td> <td>0.0</td> <td>3768.</td> <td>hex3o2+ho2=>hex3o+oh+o2</td> <td>1.40E+16</td> <td>-1.6</td> <td>1860.0</td>	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
312. coll-3-bn/2-chi/2-4h/2-2 2.412+3 0.0 0.0 377. hs/20 ⁻ /m/20 ⁻	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
3733. edil3-3-hudre-6hil2-3-hudre-6hil2-3-hudre-backback-backbackbackbackbackbackbackbackbackback	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
314. 6012-10.2-Max30	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
315. chl2-tho2-mszt0zhij 7,44e03 2,3 11080.0 3773. hex3-expresseth 1.515-13 0.0 1400.0 316. chl2-tho2-mszt0zhij 7,44e03 2,3 11080.0 3774. hex3-expl3/netChrohi 5,22e1.1 0.0 1409.0 3171. chl2-tho2-mszt0zhij 1,74e03 2,3 11080.0 3774. hex3-expl3/netChrohi 5,22e1.1 0.0 1409.0 3171. chl2-tho2-mszt0zhij 1,72e1.2 0.0 1409.0 3775. cellizotho-chl3-trico2 3,72e1.2 0.0 -100.0 3222. hex1ch1/j->chl1-thi2+thi2+to2 3,22e1.1 0.0 1409.0 3775. cellizotho-chl3-trico2 3,22e1.2 0.0 -100.0 3722. hex1ch1/j->chl1+thi2+to2 3,22e1.1 0.0 1475.0 0.0 -100.0 1781. cellizotho-chl3-trico2 3,20e1.2 0.0 -100.0 1782.2 0.0 1282.4 0.0 -100.0 1492.0 1.001.1 1.002.1 0.0 1292.4 0.0 1292.4 0.0 1.002.1 0.0 1100.0 1292.4 0.0 1.002.1 0.0 1.002.1 0.0 1.002.1 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
315. 6612-2-btod-messolubij 7.74br03 2.3 11080.0 3774. hex3-cc2btod-mc2bbrden 5.22br13 0.0 11690.0 3175. 6612-2-btod-messolubij 7.74br03 2.3 11080.0 3775. hex3-cc2btod-mc2bbrden 5.22br13 0.0 11690.0 1000.0 3175. 6612-2-btod-messolubij 1.52br13 0.0 1000.0 <t< td=""><td>3715.</td><td>c6h12-1+ho2=hex2o2h1j</td><td>7.74E+03</td><td>2.3</td><td>11080.0</td><td>3773.</td><td>hex3o=nprcoet+h</td><td>1.51E+13</td><td>0.0</td><td>18070.0</td></t<>	3715.	c6h12-1+ho2=hex2o2h1j	7.74E+03	2.3	11080.0	3773.	hex3o=nprcoet+h	1.51E+13	0.0	18070.0
317. 6kl2=2h02=has2ab2ig 7.74E=03 2.3 11680.0 3775. has2a=2m5+nc3irAcha 5.28E+13 0.0 11690.0 378. 6kl2=3h02=has2ab5a=cl5hxah 1.098.0 377. dkl2=ab2a=cl5hxah 4.408+12 0.0 1450.0 379. bakis2h2=cl5hxah 1.098.0 377. dkl2=ab2a=cl5hxah 4.408+12 0.0 1453.0 3719. bakis2h2=cl5hxah 1.098.0 377. dkl2=ab2a=cl5hxah 4.408+12 0.0 1435.0 3722. bakis2h1=>cl5hxah 4.808+11 0.0 28700.0 376. dkl2=abcechill=1+coc 3.208+12 0.0 1459.0 3723. bakis2h1=>cl5hxah 1.88E+10 1.2 2700.0 376. dkl2=abcechill=1+coc 1.88+15 -0.7 1390.0 3724. bakis2h1>>cl5hxah 1.88E+10 1.2 2700.0 376. dkl2=abcechill=1+coc 1.88+15 -0.7 1390.0 3724. bakis2h1>>cl5hxah 1.88E+10 1.88E+10 2.008+13 0.0 2.008+13 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 0.0 4.408+12 <	3716.	c6h12-2+ho2=hex2o2h3j	7.74E+03	2.3	11080.0	3774.	hex3o=c2h5cho+nc3h7	5.25E+13	0.0	11690.0
318. chl2-shuol-ska2chij 1.58r04 2.3 1108.0 3776. hszloża-ożmoprocet-ho2 3.61r10 0.0 1090.0 319. hszlożaj-ochiny-schlav-schlav-ska2chij 1.28r09 1.3 2490.0 3776. chl2oe-horeChl1-1+co2 1.37r12 0.0 -1000.0 310. hszložaj-ochiny-schlav-tschlav 1.08r11 0.0 2870.0 3775. chl2oe-horeChl1-1+co2 1.32r12 0.0 -1001.0 312. hszložaj-ochiny-tschlav-tschlav 1.08r11 0.0 2870.0 3775. chl2oe-horeChl13+co2 3.78r12 0.0 -1010.0 312. hszložaj-ochiny-tschlav-tschl	3717.	c6h12-2+ho2=hex3o2h2j	7.74E+03	2.3	11080.0	3775.	hex3o=c2h5+nc3h7cho	5.25E+13	0.0	11690.0
3710. hakložij~c3bointsin'edn 1.08409 1.4 29800.0 3777. chil2onh~chil3-teco 4.08712 0.0 -1459.0 3720. hakložij~c3bointsin'edn 5.088711 0.7 28700.0 3778. chil2on+~chil3-teco 3.02812 0.0 -4370.0 3721. hakložij~c3bointsin'edn 1.08700.0 3780. chil2on+~chil1+teco 3.02812 0.0 -4370.0 3722. hakložij~c3bointsin'edn 1.08700.0 3780. chil2on+~chil1+teco 3.02812 0.0 -4370.0 3723. hakložij~c3bointsin'edn 1.08700.0 3782. chillon-co-chilli+teco 3.22812.0 0.0 -4370.0 3725. hakložij~c3bointsin'edn 3.58109 1.2 22000.0 3782. chillon-co-chilli+teco 1.08813 -0.7 12810.0 3725. hakložij~c2bardinchil-tekal 3.58109 1.2 22000.0 3786. chillon-co-chillon-co-chillon-co-chillon 3.0812.0 0.0 3782.2 0.0 0.0 3787. chillon-co-c	3718.	c6h12-3+ho2=hex3o2h4j	1.55E+04	2.3	11080.0	3776.	hex3o+o2=>nprcoet+ho2	3.61E+10	0.0	1090.0
3720. hexic/bij=>chilo=1en2eich 1.28109 1.3 24000.0 3778. chil2co+lenchil=1=1ec2 2.32112 0.0 -1010.0 3721. hexic/bij=>chil2po+lenchil 2.008413 0.0 2700.0 3770. chil2co+lenchil1=1ec2 2.02412 0.0 1459.0 3722. hexic/bij=>childpo+lenchil1=1ec2 2.008413 0.0 22700.0 3780. chillco+hechil1=1ec2 2.02412 0.0 1459.0 3724. hexic/bij=>childpo+lenchi 5.086411 0.7 28700.0 3780. chillco+hechil1=1ec2 1.33815 -0.7 12920.0 3727. hexic/bij=>childpo+lenchi 1.3815 -0.7 12920.0 3780. chillco+hechil2enchica 1.00813 0.0	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
3721. heskožné j->cshé p->cshé p	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
3722. hexlo2hij=x5hip=roch1-3 2,000+13 0.0 2870.0 3781. cfhl0cx+hech1115+co 4.06P:12 0.0 1010.0 3724. hexlo2hij=x5hip=rohp+roch2-1 3.08F:11 0.0 2870.0 3781. cfhl0cx+hech1013+co2 3.20F:12 0.0 -1010.0 3724. hexlo2hij=x5hip=rohp+roch2-1 3.08F:11 0.7 2700.0 3781. cfnl0cx+hech1013+co2 3.20F:12 0.0 -437.0 3724. hexlo2hij=x5hip=rohp+roch2-1 3.08F:11 0.7 2700.0 3781. cfnl0cx+hech1013+co2 1.83F:15 -0.7 12910.0 3725. hexlo2hij=x5hip+rohp+roch2-1 1.83F:15 0.7 12910.0 3746. cfhl0cx+hech1010+co2 1.00F:13 0.0 1000.0 0.0 3725. hexlo2hip+rohp+rohp 7.00F:12 0.0 1000.0 3786. cfhl0cx+hech100+co2+hech10+	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
3723. hezd2bij=chd:=chd:exchip=chd:=chd:scherb 4.87:12 0.0 -1010.0 3781. cfh10c+cherbh1115+c2d 3.728+12 0.0 -1010.0 3724. hezd2bij=chd:=chd:scherb 1.88:19 0.7 28700.0 3781. cfh10c+cherbh113+c2d 3.208+11 -0.7 12910.0 3725. hezd2bij=chd:=chd:scherb 1.88:19 1.2 2700.0 3784. hezd2bij <chd:=chd:scoherbc< td=""> 1.88:11 -0.7 12910.0 3727. hezd2bij=chd:=chd:scherb 1.88:19 1.2 2700.0 3784. chd:scoherbc-chd:scoherb2 1.008:11 0.0 0.0 3727. hezd2bij=chd:=chd:scherb 1.008:11 0.7 2070.0 3786. chd:scoherbc-chd:scherbcoh 1.008:11 0.0 0.0 3728. hezd2bij=chd:=chd:scherb 7.008:12 0.0 -1000.0 3791. chd:scoherb 1.008:12 0.0 1.000.0 3733. hezd2c=ch13=-shezd>-thsta 7.008:12 0.0 -1000.0 3792. chd:scoherb 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.08:11 0.0 1.00:11 1.00:11</chd:=chd:scoherbc<>	3722.	hex1o2h5j=>c3h6+prooh1-3	2.00E+13	0.0	28700.0	3780.	c6h10co+h=c6h1115+co	4.40E+12	0.0	1459.0
3724. hex2o2h4j=>ch4h5-1+ch3ch+orh 1.182+09 1.2 22700.0 3782. oftl0c+orech1013+co2 3.20E+12 0.0 -437.0 3725. hex2o2h7+1 5.08E+11 0.7 23700.0 3784. procence-shc3h7coch4tco 1.83E+15 -0.7 12910.0 3726. hex3o2h1=>ch4t-sh82och1= 0.88E+11 0.7 23700.0 3785. oftl9coch+ot=04Psoch4oc 2.00E+13 0.0 0.0 0.0 3728. hex3o2h1=>ch4t-sh82och1= 0.88E+11 0.7 23700.0 3786. oftl9coch+ot=04Psoch4oc 2.00E+13 0.0 0.0 0.0 3728. hex3o2h1=>ch4t-sh82och1= 0.08E+11 0.0 -1000.0 3786. oftl9coch+ot=04Psoch4oc 4.00E+13 0.0 1.00E+13 0.0 1780.0 3710. hex1o2+ch11=>hex1o+hex2o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3786. oftl9coch+ot=04Psoch4b2o 2.00E+13 0.0 1.00E+13 0.0 1.00E+12 0.0 </td <td>3723.</td> <td>hex2o2h1j=>ch2cho+pc4h9+oh</td> <td>4.87E+12</td> <td>0.3</td> <td>29600.0</td> <td>3781.</td> <td>c6h10co+oh=c6h1115+co2</td> <td>3.73E+12</td> <td>0.0</td> <td>-1010.0</td>	3723.	hex2o2h1j=>ch2cho+pc4h9+oh	4.87E+12	0.3	29600.0	3781.	c6h10co+oh=c6h1115+co2	3.73E+12	0.0	-1010.0
3725. hex262b5j=>clh4=proxh2=1 5.08F11 0.7 2700.0 3781. etcotor=tocetp=co 1.83E+15 -0.7 12910.0 3726. hex362b1=>>clh4=proxh2=hort 1.85F19 0.2 2700.0 3786. ethcoth=hort 2.00E+13 0.0 0.0 0.0 3727. hex362b1=>>clh4=clh4=kd3coh1] 5.08F11 0.7 2700.0 3786. ethScoth=hort=Alscoc+h2 1.00E+13 0.0 </td <td>3724.</td> <td>hex2o2h4j=>c4h8-1+ch3cho+oh</td> <td>1.18E+09</td> <td>1.2</td> <td>22700.0</td> <td>3782.</td> <td>c6h10co+o=c6h1013+co2</td> <td>3.20E+12</td> <td>0.0</td> <td>-437.0</td>	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
3726. hex3ch1j=>ch4=hc3hr6=hc4h 3.524+09 1.2 21900.0 3784. precomec>=nch1 ⁺ coch2=co 1.832+15 -0.7 12810.0 3727. hex4c2h1j=>c3ht+c4h82ooh1j 5.081+1 0.7 22700.0 3786. c4h9coch+c2=c0+3bcoco+h20 1.002+13 0.0 4220.0 0.0 3728. hex1c2+ch13-3=hex1c+hex10 7.008+12 0.0 3786. c4h9coch+cd=ch3coco+h20 1.002+13 0.0 4200.0 0.0 3786. c4h9coch+cd=ch3coco+h20 2.001-13 0.0 4200.0 0.0 3786. c4h9coch+cd=ch3coco+h20 2.001-13 0.0 1260.0 3786. c4h9coch+cd=ch3coco+h20 2.001-13 0.0 1260.0 3786. c4h9coch+cd=h3coco+h20 2.012-10 1260.0 1260.0 3786. c4h9coch+cd=h3coco+h20 2.012-10 1260.0 <td< td=""><td>3725.</td><td>hex2o2h5j=>c3h6+prooh2-1</td><td>5.08E+11</td><td>0.7</td><td>28700.0</td><td>3783.</td><td>etcoetco=etcoetp+co</td><td>1.83E+15</td><td>-0.7</td><td>12910.0</td></td<>	3725.	hex2o2h5j=>c3h6+prooh2-1	5.08E+11	0.7	28700.0	3783.	etcoetco=etcoetp+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
3127. hexdoh2j=>23146+c2bishcotha 1.188+09 1.2 22700. 3785. ch40cotho+hec4h9coch1a 1.00E+13 0.0 4200.0 3728. hexdol+c6h13-=hex1o+hex20 7.00F+12 0.0 -1000.0 3785. ch40cotho+hec4h9cocoh20 4.00E+13 0.0 4200.0 3730. hex1o2+c6h13-=bex1o+hex20 7.00F+12 0.0 -1000.0 3785. ch40cotho+hec4h9cocoh20 2.90E+12 0.0 4200.0 3731. hex1o2+c6h13-=bex20+tex20 7.00F+12 0.0 -1000.0 379. ch40cotho+th3=c4h9coco+th3=c4h9coco+th3 1.15E+11 0.0 8440.0 3733. hex2o2+c6h13-=bex20+tex20 7.00F+12 0.0 -1000.0 379. ch40cotho+th30=c4H9coco+th30=c4H9coco+th30+14 0.0 1280.0 3735. 3735. hex3o2+c6h13-=bex30+tex20 7.00F+12 0.0 -1000.0 379. ch40cocho+th30=c4H9coco+th30=c4H9coco+th30+14 0.0 2.90F+18 7 1291.0 0.0 3735. hex3o2+c6h13-=bex30+tex30+tex30 000.0 3795. ch40cocho+th30=c4H9coco+th30=c4H9coco+th30+tex30	3726.	hex3o2h1j=>c2h4+nc3h7cho+oh	3.53E+09	1.2	21900.0	3784.	prcomeco=>nc3h7coch2+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
3728. hxx4o2h1j=oc2h4+c4h2ooh1j 5.08E+11 0.7 2870. hxx1o2+ch13+=hxx1o+hx2o 1.00E+13 0.0 4200.0 3739. hxx1o2+ch13+=hxx1o+hx2o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3788. ch13coch+t=ch13coch+tac3 0.0 4200.0 3731. hxx1o2+ch13+=hx1o+hx2o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3788. ch13coch+tac3H3coco+h2 2.00E+12 0.0 1790.0 3731. hxx1o2+ch13+=hx2o+hx2o+hx2o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3790. ch13coch+tac3H3coco+h2 100E+12 0.0 1400.0 3731. hxx2o+ch13+=hx2o+hx2o+hx2o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3791.ch13coch+ch3o=dh3coco+ch3o2 1.00E+12 0.0 9500.0 3735. hx3o2+ch13+=hx2o+hx3o+hx3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3794.ch12coch+ch3o=dh3coco+ch3o2 1.881E+10 0.0 -5600.0 3736. hx3o2+ch13+=hx2o+hx3o+hx3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3794.ch12coch+ch3o=dh3coco+ch3o2 1.40E+16 -1.6 1880.0 3737. hx3o2+ch13+=hx3o+hx2o+hx3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3796.ch12coch+ch2=bx1oc+0h3o 1.40E+16	3727.	hex4o2h2j=>c3h6+c2h5cho+oh	1.18E+09	1.2	22700.0	3785.	c4h9cocho+o2=c4h9coco+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
3729. hexiol-efilial-lenekioheska 4.00Er13 0.0 4200. 3730. hexiol-efilial-lenekioheska 7.00Er12 0.0 -1000.0 3787. chislochesha-chislocochia 5.00Er12 0.0 1780. 3731. hexiol-efilial-shekioheska 7.00Er12 0.0 -1000.0 3789. chislocochia/schislocochia 2.80Er12 0.0 1860.0 3731. hexiol-efilial-shekioheska 7.00Er12 0.0 -1000.0 3791. chislocochictia/schislocochia 1.70Er12 0.0 1860.0 3733. hexiol-efilial-shekioheska 7.00Er12 0.0 -1000.0 3791. chislocochictia/schislocochia/schii/schislocochia/schii/schislocochia/schislocochia/schislocochia/s	3728.	hex4o2h1j=>c2h4+c4h82ooh1j	5.08E+11	0.7	28700.0	3786.	c4h9cocho+oh=c4h9coco+h2o	1.00E+13	0.0	0.0
3730. hexio2+c6h13-bexio+hex20 7.00E+12 0.0 -1000.0 378b. c4h9cocho+do=c4h9coco+h2C 2.60E+12 0.0 1790.0 3731. hexio2+c6h13-bexio+hexio 7.00E+12 0.0 -1000.0 3790. c4h9cocho+do=c4h9coco+h2C 2.60E+12 0.0 1800.0 3731. hexio2+c6h13-bexio+bexio 7.00E+12 0.0 -1000.0 3790. c4h9cocho+do=c4h9coco+h3ch 1.50E+12 0.0 1200.0 3734. hexio2+c6h13-bexio+bexio 7.00E+12 0.0 -1000.0 3792. c4h9cocho+do=c4h9coco+h3c2 1.00E+12 0.0 1200.0 3735. hexio2+c6h13-bexio+bexio 7.00E+12 0.0 -1000.0 3794. etosetp+do=etoce+do 2.11E+10 0.0 -560.0 3736. hexio2+c6h13-bexio+bexio 7.00E+12 0.0 -1000.0 3796. etosetp+do=etoce+do 2.11E+10 0.0 -560.0 3736. hexio2+ch3=bexio+bexio 7.00E+12 0.0 -1000.0 3796. etosetp+do=etoc+hot=hot=hot=hot=hot=hot=hot=hot=hot=hot=	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
3731. hexlo2+ch13-3-hexlo+hexlo 7.00E+12 0.0 -1000.0 3790. c489coch+ch3-edh9coc+ch3 1.07E+12 0.0 8400.0 3731. hexlo2+ch13-s-hexlo+hexlo 7.00E+12 0.0 -1000.0 3791. c489coch+ch3-edh9coc+ch3 1.05E+11 0.0 8400.0 3734. hexlo2+ch13-3-hexlo+hexlo 7.00E+12 0.0 -1000.0 3791. c489coch+ch3oe-ch430c2 1.08E+15 -0.0 9500.0 3736. hexlo2+ch13-3-hexlo+hexlo 7.00E+12 0.0 -1000.0 3793. c489coch+ch3oe-ch3oet 8.00E+18 -0.7 2.10E+10 0.0 9500.0 3736. hexlo2+ch13-3-hexlo+hexlo 7.00E+12 0.0 -1000.0 3794. ectoset2+ho2=pentlo21h3*+oc2 2.11E+10 0.0 9366.0 3736. ch13-2+ho2=hexlo+hexlo 7.00E+12 0.0 -1000.0 3794. ectoset2+ho2=pentlo21h*oc4 2.02E+18 0.0 2.00E+18 -2.5 0.0 3737. ch20c+ch3=hexlo+hexlo 7.00E+12 0.0 -1000.0 3794. ectoset2+ho2=pentlo21h*oc4 0.0 2.00E+18 -2.5 0.0 3740.	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
3732, hex202+c6h13-=hex20+hex20 7,00F+12 0,0 -1000.0 3790. c4h3cocho+ch3=ch3ecdh3cocho+ch3 1,15F+11 0,0 1280.0 3733, hex202+c6h13-=bex20+hex20 7,00F+12 0,0 -1000.0 3792. c4h3cocho+ch3o=c4h3cocho+ch3o2h 1,00F+12 0,0 9500.0 3734, hex202+c6h13-=bex30+hex30 7,00F+12 0,0 -1000.0 3794. etcoeto2h3coha-ch3o2h 1,00F+12 0,0 9500.0 3737, hex302+c6h13-=bex30+hex30 7,00F+12 0,0 -1000.0 3794. etcoeto2h202=pent102h3*0+to2 2,11F+10 0,0 -3640.0 3738, c6h13-=hho2=hex30+hex30 7,00F+12 0,0 -1000.0 3795. etcoeto2+ho2=pent102h3*0+to2 2,41F+12 0,0 996.0 3738, c6h13-=hho2=hex30+hex30 7,00F+12 0,0 -1000.0 3797. etcoeto2+ho2=pent102h3*0+to2 2,41F+12 0,0 996.0 3740, c6h13=+hho2=hex30+ha 7,00F+12 0,0 -1000.0 3798. etcoeto2+ho2=pent102h3*0+to2 2,41F+12 0,0 996.0 3794. etcoeto2+ho2=pent102h3*0+to2 2,00F+18 -2,5 0,0 3741, c6h23=hex30+ho3 7,00F+12 0,0 -1000.0 3798. etcoeto2+ho2=bent02h3*0+coch3+d2 2,00F+13 0,0<	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
3733, hex2o2+c6h13-2=hex2o+hex2o 7,00E+12 0.0 -1000.0 3791, ch49coch+ch3o2=ch49coch+ch3o2 1.05E+11 0.0 1280.0 3734, hex2o2+c6h13-1=hex2o+hex2o 7,00E+12 0.0 -1000.0 3793. ch49coch+ch3o2=ch49coch+3o2 9.00E+18 -2.5 0.0 3736, hex3o2+c6h13-2=hex3o+hex2o 7,00E+12 0.0 -1000.0 3794. etcocpt-o2=tcocc0 9.00E+18 -2.5 0.0 3738, ceh13-2+hex3o+hex3o 7,00E+12 0.0 -1000.0 3795. etcocc2+ho2=pent1o2h3*o+o2 2.41E+10 0.0 -3640.0 3739, ceh13-2+hox3o+hex3o+h 7,00E+12 0.0 -1000.0 3794. etcocp2+ho2=setcoeto+oho2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3740, ceh13-3+hoz4bex3o+h 7,00E+12 0.0 -1000.0 3794. etcocp2+ch3o2=setcoeto+oho2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3741, hex1o2+ch3shex3o+h3 7,00E+12 0.0 -1000.0 3801. etcocpt-och3o2=coetoeto+oho2 2.11E+10 0.0 220.0 3744, ch613-2+hox3o+h3 7,00E+12 0.0 -1000.0 3801. proch2o2+ho2=perch2o4ch3o=setco+oho2 2.11E+10 0.0 220.0 3744, ch613-2+hox3o+hax3o+h30 7,00E+12 0.0	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
3734, hex2o2+chil3-j=hex2o+hex3o 7.00E12 0.0 -1000.0 3792, ch49coch+ch3o2m 1.00E12 0.0 9500.0 3735, hex3o2+chil3-j=hex3o+hex3o 7.00E12 0.0 -1000.0 3794, ch43ocom 9.00E18 -2.5 0.0 3736, hex3o2+chil3-j=hex3o+hex3o 7.00E12 0.0 -1000.0 3795, etcoset20+ho2=pent1o2h3*0+o2 2.11E+10 0.0 -3640.0 3738, ch332+ho2=hex3o+oh 7.00E12 0.0 -1000.0 3796, etcoset20+ho2=pent1o2h3*0+o2 2.41E+12 0.0 9936.0 3740, c6h13=3+ho2=hex3o+oh 7.00E12 0.0 -1000.0 3796, etcoset20+ho2=pent1o2h3*0+ho2 2.40E+16 -1.6 1860.0 3741, hex1o2=ch13=kex1o+ha3 7.00E+12 0.0 -1000.0 3799, etcoset2=ho2=betcost0+ho2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3742, hex2o=ch13=kex1o+ha3 7.00E+12 0.0 -1000.0 3799, etcoset2=ho2=betcost0+ho2 2.1E+10 0.0 2000.0 3744, c6h13=4ho2=hex1o+ha3 7.00E+12 0.0 -1000.0 3801, nch7coh2+c2=betcost0+ha2 2.1E+10 0.0 2000.0 3744, c6h13=4ho2=hex1o+ha3 7.00E+12 0.0 -1000.0 3803	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
3735. hex3024c6h13-l=hex30+hex10 7.00E+12 0.0 -1000.0 3793. cdh30cocmcd+b0c+co 1.83E+15 -0.7 1291.0 3736. hex3024c6h13-3=hex30+hex30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3795. etcoet024h02=pent102h3*o+hc2 2.11E+10 0.0 -3640.0 3736. c6h13-2+hc2=hex30+hc30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3795. etcoet024h02=pent102h3*o+hc2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3736. c6h13-2+hc2=hex20+ch 7.00E+12 0.0 -1000.0 3797. etcoet024h02=pent102h3*o+hc2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3741. hex102+ch3=hex10+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3799. etcoet02+h02=pent102h3*o+hc2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3741. hex202+ch3=hex20+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3800. etcoet02+h02=pent102h2*o+02 9.00E+18 -2.5 0.0 3743. hex302+ch3=hex30+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3800. etcoet02+h02=pent102h2*o+02 2.11E+10 0.0 -2400.0 3744. hex102+h02=hex10+ch3o 7.00E+12 0.0 -	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
3736. hex302+c6113-2=hex30+hex30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3794. etcotp+02=tcotot2/h.02=pent102h3*0+02 2.11E+10 0.0 -3640.0 3737. hex302+c6113-2=hex30+hex30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3795. etcoto2+h.02=pent102h3*0+02 2.14E+12 0.0 9936.0 3739. c6h13-2+ho2=hex30+0h 7.00E+12 0.0 -1000.0 3795. etcoto2+h02=>tcoto2+h04=02 1.40E+16 -1.6 1860.0 3740. c6h13-2+ho2=hex30+0h 7.00E+12 0.0 -1000.0 3795. etcoto2+h02=>tcoto2+h030=>tcoto4+h03=0 1.40E+16 -1.6 1860.0 3741. hex102+h3=hex10+ch30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3799. etcoto2+h02=>tcoto4+h03=0 2.00E+18 -2.5 0.0 3744. c6h13-2+hex30+ch30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3801. nc3h7coch2+02=proch202 9.00E+18 -2.5 0.0 3744. c6h13-2+ch302=hex30+ch30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3801. proch20+h02=proch20+20=3 -0.0 2.00E+18 -1.6 1.600.0 3801. proch20+h02=proch20+h02=proch20+h02 2.11E+10 0.0 -3640.0 3744. c6h13-2+ch302=hex30+ch30 7.00E+12 0.0 -1000.0 3801. proch20+h02=proch20+h02=proch20+h02	3735.	hex3o2+c6h13-1=hex3o+hex1o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3793.	c4h9coco=nc4h9co+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3736.	hex3o2+c6h13-2=hex3o+hex2o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3794.	etcoetp+o2=etcoeto2	9.00E+18	-2.5	0.0
3738. ch13-1+ho2=hex1o+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0 3796. etcoeto2+h2o2=pent1o2h3+o+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0 3739. ch13-2+ho2=hex3o+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0 3797. etcoeto2+ho2=betcoeto+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3740. ch13-3+ho2=hex3o+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0 3798. etcoeto2+ho2=betcoeto+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0 3741. hex1o2+ch3=hex2o+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3799. etcoeto=ch2o+c25h5cch2 2.00E+13 0.0 22000.0 3743. ch312+hb32=hex3o+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3801. nc3h7coch2eo2=proceh2o 2.11E+10 0.0 -3640.0 3744. ch313+tch302=hex3o+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3803. procch2o2+ho2=pent1o2h2+o+ho2 2.11E+10 0.0 -3640.0 3746. ch13-3+ch302=hex1o+ho3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3803. procch2o2+ho2=pent1o2h2+o+ho2 2.11E+10 0.0 936.0 3746. ch13-3+ch302=hex1o+ho3o 7.00E+12 0.0 -1000.0 3803. procch2o2+ho2=pent1o2h2+o+ho2 2.41E+12 0.0 936.0 3747. hex1o2+ho2=hex1o+ho4o 1.40E+16 -1.6 <td>3737.</td> <td>hex3o2+c6h13-3=hex3o+hex3o</td> <td>7.00E+12</td> <td>0.0</td> <td>-1000.0</td> <td>3795.</td> <td>etcoeto2+ho2=pent1o2h3*o+o2</td> <td>2.11E+10</td> <td>0.0</td> <td>-3640.0</td>	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
3739. ch13-2+ho2=hex2o+ch7.00E+120.0-1000.03797. etcoeto2+ho2=>etcoeto+ch+o21.40E+16-1.61860.03740. c6h13-3+ho2=hex3o+ch37.00E+120.0-1000.03799. etcoeto=ch2o+c2h5och22.00E+130.02000.03741. hex1o2+ch3=hex1o+ch3o7.00E+120.0-1000.03799. etcoeto=ch2o+c2h5och22.00E+130.02000.03742. hex2o2+ch3=hex2o+ch3o7.00E+120.0-1000.03800. etcoeto=ch2o+c2h5och22.00E+140.0220.03744. c6h13-1+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0-1000.03802. proch2o2+ho2=pertlo2h2*o+o22.11E+100.0-3640.03745. c6h13-2+ch3o2=hex2o+ch3o7.00E+120.0-1000.03803. proch2o2+ho2=pertlo2h2*o+o22.41E+120.0-3640.03746. c6h13-2+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0-1000.03803. proch2o2+ho2=pertlo2h2*o+o22.41E+120.0-3640.03747. hex1o2+ho2=hex1o+ho22.41E+120.0-1000.03803. proch2o2+ho2=pertlo2h2*o+o21.40E+16-1.61860.03747. hex1o2+ho2=hex1o+ho22.41E+120.0-1000.03803. proch2o2+ho2=percoh2o+ch3o+o21.40E+16-1.61860.03748. hex1o2+ho2=hex1o+ho41.50E+160.04250.03807. proch2o+ch3o2=proch2o+ch3o+o21.40E+16-1.61860.03751. hex1o2+ho2=hex1o+ho41.50E+160.04250.03807. proch2o+ch2o=c51d2ox+ho21.40E+16-1.61860.03751. hex1o2+ho2=hex1o+ho41.50E+160.04250.03807. proch2o+ch3o=ch1+	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
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	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
3741.hexlo2+ch3=hexlo+ch3o7.00E+120.0-1000.03799.etcoeto=ch2o+c2h5coch22.00E+130.020000.03742.hex3o2+ch3=hex3o+ch3o7.00E+120.0-1000.03800.etcoeto+o2=c5ald3ox+ho29.00E+18-2.50.03744.ch13=+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0-1000.03802.prcoch2o2+ho2=pentlo2h2*o+o22.11E+100.0-3640.03744.ch13=+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0-1000.03804.prcoch2o2+ho2=pentlo2h2*o+o22.11E+100.0-3640.03745.ch13=+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0-1000.03804.prcoch2o2+ho2=ppcch2o+oho22.11E+100.0-3640.03746.ch13=+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0-1000.03804.prcoch2o2+ho2=ppcch2o+oho21.40E+16-1.61860.03747.hexlo2+ho2=hexlo2+	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
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3741.	hex1o2+ch3=hex1o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3799.	etcoeto=ch2o+c2h5coch2	2.00E+13	0.0	20000.0
3743.hex3o2+ch3=hex3o+ch3o7.00E+120.0 -1000.0 3801.nc3h7coch2o2=precch2o29.00E+18 -2.5 0.03744.c6h13-2+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0 -1000.0 3802.procch2o2+ho2=pret1o2h2*o+ho22.11E+100.0 -3640.0 3745.c6h13-2+ch3o2=hex1o+ch3o7.00E+120.0 -1000.0 3803.procch2o2+ho2=pretoch2*o+ho22.41E+120.0 -3640.0 3746.c6h13-3+ch3o2=hex1o+ha22.29E+110.0 -1000.0 3804.procch2o2+ha2=procch2o+ch3o+o+ho21.40E+16 -1.6 1860.03747.hex1o2+ho2=hex1o2h+o22.41E+120.09936.03805.procch2o2+ch3o2=procch2o+ch3o+o21.40E+16 -1.6 1860.03749.hex1o2+ho2=hex1o2h+o22.41E+120.09936.03807.procch2o=ch2o+nc3h7ca2.00E+130.0220.03750.hex1o2+ho2=hex1o+hho21.40E+16 -1.6 1860.03808.c6h1015=c3h5-a+c3h5-a3.16E+35 -6.0 67620.03751.hex1o2+ho2=>hex1o+hhex1o+c21.40E+16 -1.6 1860.03809.c6h1015=c2h3+c4h7143.25E+22 -2.7 9830.23752.hex1o2+ho2=>hex1o+hex1o+c22.41E+100.00.03811.c6h1015+h=c3h5-a+c3h5-a+h714 $3.25E+22$ -2.5 11048.43754.hex1o2=hex1o+hex1o+c41.70E+130.020510.03811.c6h1015+h=c3h5-a+h714 $3.25E+22$ -2.5 11048.43754.hex1o=c2ho+c2ho+c2+bc2hc23.61E+100.0 </td <td>3742.</td> <td>hex2o2+ch3=hex2o+ch3o</td> <td>7.00E+12</td> <td>0.0</td> <td>-1000.0</td> <td>3800.</td> <td>etcoeto+o2=c5ald3oxo+ho2</td> <td>8.43E+09</td> <td>0.0</td> <td>220.0</td>	3742.	hex2o2+ch3=hex2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3800.	etcoeto+o2=c5ald3oxo+ho2	8.43E+09	0.0	220.0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3743.	hex3o2+ch3=hex3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0	3801.	nc3h7coch2+o2=prcoch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
3745. $c 6h13-2+ch3o2=hex2o+ch3o$ 7.00E+120.0-1000.03803. $prcoch2o2+h2o2=pent1o2h2*o+ho2$ 2.41E+120.09936.03746. $c 6h13-3+ch3o2=hex3o+ch3o$ 7.00E+120.0-1000.03804. $prcoch2o2+ho2o2+prcoch2o+h+o2$ 1.40E+16-1.61860.03747. $hex1o2+ho2=hex1o+ho22.29E+110.0-1790.03805.prcoch2o+ch2o+ch2o+prcoch2o+ch3o+o21.40E+16-1.61860.03748.hex1o2+ho2=hex1o+ho41.50E+160.042500.03807.prcoch2o+ch2o+ch3o+ho28.43E+090.022000.03750.hex1o2+ho2=hex1o+ch+o21.40E+16-1.61860.03808.ch1015=ch3+ch7142.00E+130.02200.03751.hex1o2+hex1o+ch3o=hex1o+ch3o+c21.40E+16-1.61860.03810.ch1015=ch3+ch7142.00E+19-1.096770.03752.hex1o=hex1o+ch3o+c22.41E+100.00.03810.ch1015+h=c3h5-a+c3h64.31E+23-2.79830.23753.hex1o=ch2o+c5h11-19.12E+130.020510.03811.ch1015+h=c3h5-a+c3h64.31E+23-2.79830.23754.hex1o=ch2o+c5h11-19.12E+130.014360.03812.ch1015+h=c3h-a+h21.00E+120.00.03755.hex2o=hex2o+ho23.61E+100.01090.03813.ch1015+h=c3h+21.00E+120.00.03755.hex1o=ch2o+c5h11-19.61E+100.0-1790.03814.ch1015+h=c6h9153+h2$	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
3746. $c6h13-3+ch3o2=hex3o+ch3o$ 7.00E+120.0-1000.03804. $prcoch2o2+ho2=>prcoch2o+ch+o2$ 1.40E+16-1.61860.03747. $hex1o2+ho2=hex1o2h+o2$ 2.29E+110.0-1790.03805. $prcoch2o2+ch3o2=>prcoch2o+ch3o+o2$ 1.40E+16-1.61860.03748. $hex1o2+ho2=hex1o2h+ho2$ 2.41E+120.09936.03806. $prcoch2o+ch3o2=>prcoch2o+ho22.00E+130.020000.03750. hex1o2+ho2=>hex1o+ho+c21.40E+16-1.61860.03807. prcoch2o+c2=cSa1d2ox+ho28.43E+490.0220.03751. hex1o2+ho2=>hex1o+ch5o+c21.40E+16-1.61860.03809. c6h1015=c3h5-a+c3h5-a3.16E+35-6.067620.03752. hex1o2+hex1o=>hex1o+chex1o+c22.41E+100.00.03809. c6h1015=c2h3+c4h7142.00E+19-1.096770.03752. hex1o2+hex1o=>hex1o+chex1o+c22.41E+100.00.03810. c6h1015+h=c3h5-a+c3h64.31E+23-2.79830.23753. hex1o=c5h11cho+h1.70E+130.020510.03811. c6h1015+h=c3h4-a+c3h5-a+h21.00E+120.00.03755. hex1o=c2o+ho2=>c5h11cho+ho23.61E+100.01090.03813. c6h1015+h=c3h4-a+c3h5-a+h21.00E+120.00.03756. hex2o2+ho2==hex2o+ho22.29E+110.0-1790.03814. c6h1015+h=c3h53+h21.08E+052.5-1900.03756. hex2o2+ho2==hex2o+ho22.29E+110.0-1790.03813. c6h1015+h=c3h53+h21.28E+042.0E+110.07100.03757. hex2o2+ho2==hex2o+ho22.41E+12$	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
3747.hex1o2+ho2=hex1o2h+o22.29E+110.0 -1790.0 3805.prcoch2o2+ch3o2=>prcoch2o+ch3o+o2 $1.40E+16$ -1.6 1860.0 3748.hex1o2+ho2)=hex1o2hho2 $2.41E+12$ 0.0 9936.0 $3806.$ $prcoch2o=ch2o+chc3h7co$ $2.00E+13$ 0.0 2000.0 3749.hex1o2h=hex1o+hho2 $1.50E+16$ 0.0 42500.0 $3807.$ $prcoch2o=ch2o+chc3h7co$ $8.43E+39$ 0.0 220.0 3750.hex1o2+ho2=>hex1o+oh+o2 $1.40E+16$ -1.6 1860.0 $3807.$ $prcoch2o+ch2o=ch2o+ch3h5-a+3.16E+35.067620.03751.hex1o2+ho2=>hex1o+ch3o+o21.40E+16-1.61860.03809.c6h1015=c3h5-a+c3h5-a+3.16E+35.067620.03752.hex1o2+hex1o2=>hex1o+hex1o+o22.41E+100.00.03810.c6h1015+h=c3h5-a+c3h64.31E+22.-2.79830.23753.hex1o=ch2o+c5h11-19.12E+130.014360.03811.c6h1015+h=c3h5-a+c3h5-a+h21.00E+12.-2.511048.43754.hex2o=hex2o+c5h11-19.12E+130.01090.03813.c6h1015+h=c3h+a+c3h5-a+h21.00E+12.-5.5-1900.03755.hex2o2+ho2=hex2o2h+ho22.29E+11.0.0-1790.03814.c6h1015+h=c3h15+h=2-1.6.1280.0.03757.hex2o2+ho2=hex2o2h+ho22.41E+12.0.0-1790.03813.c6h1015+h=c3h15+h=2-2.5.-1900.0.03757.hex2o2+ho2=hex2o2$	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
3748. hexlo2+h2o2=hexlo2h+ho2 $2.41E+12$ 0.0 9936.0 $3806. proch2o=ch2o+nc3h7co$ $2.00E+13$ 0.0 20000.0 3749. hexlo2h=hexlo4h $1.50E+16$ 0.0 42500.0 $3807. proch2o+o2=c5ald2oxo+ho2$ $8.43E+09$ 0.0 220.0 3750. hexlo2+ho2=>hexlo+oh+o2 $1.40E+16$ -1.6 1860.0 $3808. c6h1015=c3h5-a+c3h5-a$ $3.16E+35$ -6.0 67620.0 3751. hexlo2+hexlo2=>hexlo+hoxlo2 $1.40E+16$ -1.6 1860.0 $3809. c6h1015=ch3t-a+c3h5-a$ $3.16E+35$ -6.0 67620.0 3752. hexlo2+hexlo2=>hexlo+hexlo+o2 $2.41E+10$ 0.0 0.0 $3810. c6h1015=hc3h5-a+c3h6$ $4.31E+23$ -2.7 9830.2 3753. hexlo=c5h11cho+h $1.70E+13$ 0.0 20510.0 $3811. c6h1015+h=c3h4-a+c3h5-a+h2$ $1.00E+12$ 0.0 0.0 3754. hexlo=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. hexlo+c2=>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 $3813. c6h1015+h=c6h9153+h2$ $0.0E+04$ 2.6 1240.0 3758. hex2o2+ho2=hex2o+ho2 $2.41E+12$ 0.0 9936.0 $3815. c6h1015+ho2=c6h9153+h20$ $0.0E+04$ 2.6 1240.0 3759. hex2o2+ho2=hex2o+ho4 $9.45E+15$ 0.0 4160.0 $3816. c6h1015+hc3=c6h9153+c2h4$ $3.22E+13$ 0.0 7361.2 <t< td=""><td>3747.</td><td>hex1o2+ho2=hex1o2h+o2</td><td>2.29E+11</td><td>0.0</td><td>-1790.0</td><td>3805.</td><td>prcoch2o2+ch3o2=>prcoch2o+ch3o+o2</td><td>1.40E+16</td><td>-1.6</td><td>1860.0</td></t<>	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
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3748.	hex1o2+h2o2=hex1o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0	3806.	prcoch2o=ch2o+nc3h7co	2.00E+13	0.0	20000.0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3749.	hex1o2h=hex1o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0	3807.	prcoch2o+o2=c5ald2oxo+ho2	8.43E+09	0.0	220.0
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	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
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	3751.	hex1o2+ch3o2=>hex1o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0	3809.	c6h1015=c2h3+c4h714	2.00E+19	-1.0	96770.0
3753. hexlo=c5h11cho+h1.70E+130.020510.03811. c6h1015+h=c2h4+c4h7143.25E+22-2.511048.43754. hexlo=ch2o+c5h11-19.12E+130.014360.03812. c6h1015+h=c3h4-a+c3h5-a+h21.00E+120.00.03755. hexlo+c2=>c5h11cho+ho23.61E+100.01090.03813. c6h1015+h=c6h9153+h21.08E+052.5-1900.03756. hex2o2+ho2=hex2o2h+o22.29E+110.0-1790.03814. c6h1015+h=c6h9153+h206.08E+062.0-1520.03757. hex2o2+ho2=hex2o2h+ho22.41E+120.09936.03815. c6h1015+ho2=c6h9153+h2022.08E+042.612400.03758. hex2o2+hex2o+ho49.45E+150.041600.03816. c6h1015+ch3=c6h9153+ch42.00E+110.07300.03759. hex2o2+ho2=>hex2o+oh+o21.40E+16-1.61860.03817. c6h1015+ch3=c6h9153+ch43.22E+130.07361.2	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
3754. hexlo=ch2o+c5h11-19.12E+130.014360.03812. c6h1015+h=c3h4-a+c3h5-a+h21.00E+120.00.03755. hexlo+c2>c5h1cho+ho23.61E+100.01090.03813. c6h1015+h=c6h9153+h21.08E+052.5-1900.03756. hex2o2+ho2=hex2o2h+o22.29E+110.0-1790.03814. c6h1015+h=c6h9153+h206.00E+062.0-1520.03757. hex2o2+ho2=hex2o2+ho22.41E+120.09936.03815. c6h1015+h=c6h9153+h2021.28E+042.612400.03758. hex2o2+hex2o+ho49.45E+150.041600.03816. c6h1015+ch3=c6h9153+cch42.00E+110.07300.03759. hex2o2+ho2=>hex2o+oh+o21.40E+16-1.61860.03817. c6h1015+ch3=c6h9153+cch43.22E+130.07361.2	3753.	hex1o=c5h11cho+h	1.70E+13	0.0	20510.0	3811.	c6h1015+h=c2h4+c4h714	3.25E+22	-2.5	11048.4
3755. hexlo+o2=>c5h11cho+ho23.61E+100.01090.03813. c6h1015+h=c6h9153+h21.08E+052.5-1900.03756. hex2o2+ho2=hex2o2h+o22.29E+110.0-1790.03814. c6h1015+h=c6h9153+h206.00E+062.0-1520.03757. hex2o2+ho2=hex2o2h+ho22.41E+120.09936.03815. c6h1015+h=c6h9153+h201.28E+042.612400.03758. hex2o2h=hex2o+ho49.45E+150.041600.03816. c6h1015+ch3=c6h9153+ch42.00E+110.07300.03759. hex2o2+ho2=>hex2o+oh+o21.40E+16-1.61860.03817. c6h1015+ch3=c6h9153+ch43.22E+130.07361.2	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
3756. hex2o2+ho2=hex2o2h+o22.29E+110.0-1790.03814. c6h1015+oh=c6h9153+h2o6.00E+062.0-1520.03757. hex2o2+ho2=hex2o2h+o22.41E+120.09936.03815. c6h1015+ho2=c6h9153+h2o21.28E+042.612400.03758. hex2o2h=hex2o+oh9.45E+150.041600.03816. c6h1015+ch3=c6h9153+ch42.00E+110.07300.03759. hex2o2+ho2=>hex2o+oh+o21.40E+16-1.61860.03817. c6h1015+c2h3=c6h9153+c2h43.22E+130.07361.2	3755.	hex10+02=>c5h11cho+ho2	3.61E+10	0.0	1090.0	3813.	c6h1015+h=c6h9153+h2	1.08E+05	2.5	-1900.0
3757. hex2o2+h2o2=hex2o2h+ho22.41E+120.09936.03815. c6h1015+ho2=c6h9153+h2o21.28E+042.612400.03758. hex2o2h=hex2o+oh9.45E+150.041600.03816. c6h1015+ch3=c6h9153+ch42.00E+110.07300.03759. hex2o2+ho2=>hex2o+oh+o21.40E+16-1.61860.03817. c6h1015+c2h3=c6h9153+c2h43.22E+130.07361.2	3756.	hex2o2+ho2=hex2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0	3814.	c6h1015+oh=c6h9153+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
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	3757.	hex2o2+h2o2=hex2o2h+ho2	2.41E+12	0.0	9936.0	3815.	c6h1015+ho2=c6h9153+h2o2	1.28E+04	2.6	12400.0
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	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=pentlo+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=pentlo+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.	pent1oh+oh=pent1oh-3+h2o	7.05E+09	0.9	504.7
3827.	c6h9143=>mcps2ds1	2.45E+12	0.0	36600.0	3877.	pent1oh+oh=pent1oh-4+h2o	7.05E+09	0.9	504.7
3828.	cc6h914 = > cc6h813 + h	8.94E+13	0.0	34600.0	3878.	pent1oh+oh=pent1oh-5+h2o	1.37E+07	1.8	868.3
3829	cc6h813+h=>cc6h914	1 32E+14	0 0	3300 0	3879	pent1oh+ho2=pent1o+h2o2	6 47E-07	53	10533 0
3830	cc6b813=c6b8135	5 01E+16	0.0	88230 0	3880	pent1oh+ho2=pent1oh-1+h2o2	2 80E-05	5.3	8268 0
3831	cc6h813=c6h6+b2	2 50F+13	0.0	59000 0	3881	pent1oh+ho2=pent1oh=2+h2o2	1 50E-02	4.5	14706.0
3832	cc6b813+b=c6b7c+b2	1 085+05	2 5	-1900.0	3882	pent1oh+ho2=pent1oh=3+h2o2	1 50E-02	4.3	13076 0
3032.	$aa6b813 \pm ab = a6b7a \pm b2a$	6 00E+05	2.5	-1520.0	3002.	pont1oh+ho2=pont1oh=4+h2o2	6 10E-02	37	13627 0
2022.	aach P12 ah 2 = ach 7 a l ah 4	0.00E+00	2.0	-1320.0	2005.	pericion+noz=pericion=4+nzoz	1 765102	2.7	17107 0
2024.	cconorstcns-con/ctcn4	2.00ETII 1.64E+06	2.5	12280.0	2004.	pention+noz-pention=5+nzoz	1.020100	3.2	1/19/.U
2025.		1.046+00	2.5	12200.0	3005.	pencion-chis-pencio+chi4	1.026+00	2.0	7600 0
2027	C008135+00=C007135-1+020	4.40E+06	2.0	2780.0	3880.	pention+cn3=pention-i+cn4	2.20E+02	3.1	7600.0
3037.	C608135+C03=C607/135-1+C04	2.72E+00	3.5	12900.0	3887.	pention+ch3=pention-2+ch4	9.20E+02	2.9	8/90.0
3838.	C4n/13+C3n5-a=C/n12	1.00E+15	-0.8	0.0	3888.	pention+cn3=pention-3+cn4	2.00E+11	0.0	9600.0
3839.	pentloh=c5hl0-1+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=pent1oh	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=pent1oh	1.00E+13	0.0	0.0	3892.	pentloh-5=pentloh-3	1.23E+08	-0.4	17510.0
3843.	pc4h9+ch2oh=pent1oh	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.	pentlo+h=pentloh	4.00E+13	0.0	0.0	3895.	pentloh-5=pentlo	8.79E+06	0.0	8796.0
3846.	pentloh-l+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	8.16E+32	-7.0	26240.0
3849.	pentloh-4+h=pentloh	4.00E+13	0.0	0.0	3899.	pentloh-4=pentlo	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=pentlo+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=pentlo	1.88E+07	0.0	16680.0
3853.	pent1oh+o2=pent1oh-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=pentlo	8.17E+06	0.0	23290.0
3855.	pent1oh+o2=pent1oh-4+ho2	2.00E+13	0.0	49800.0	3905.	pentloh-1=pentlo	3.40E+08	0.0	22970.0
3856.	pentloh+o2=pentloh-5+ho2	3.00E+13	0.0	52340.0	3906.	pentlo+o2=nc4h9cho+ho2	4.28E+10	0.0	1100.0
3857.	pentloh+h=pentlo+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.	pent1oh-1+o2=pent1en1o1+ho2	8.90E+03	2.1	470.0
3859.	pent1oh+h=pent1oh-2+h2	1.08E+05	2.7	4440.0	3909.	pent1oh-2+o2=pent1en1o1+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3860	pentloh+h=pentloh-3+h2	3 06E+04	28	3473 3	3910	pent1oh-2+o2=pent2en1o1+ho2	1 58E+12	0 0	5000 0
0000.	Declared duplicate reaction	0.002.01	2.0	01/010	3911	pentloh-3+o2=pent2enlol+ho2	1 58E+12	0.0	5000 0
3861	pentloh+h=pentloh=3+h2	5 738+13	0 1	10568 9	3912	pent1oh=3+o2=pent2en1o1+ho2	1 585+12	0.0	5000.0
5001.	Declared duplicate reaction	5.751115	0.1	10000.0	3913	pention 3:02 pention 101:02	1 585+12	0.0	5000.0
3962	portlobth=portlob_4th2	3 062+04	2 9	3173 3	301/	pention 4:02-pentioninio2	6 00F+11	0.0	5000.0
5002.	Declared duplicate reaction	3.001104	2.0	5475.5	3015	pent1oh=4+02=pent4en1o1+no2	1 595+12	0.0	5000.0
2062	periated dupitate reaction	5 72m 12	0 1	10569 0	3915.	pention-3+02-pent4enio1+no2	2 670111	0.0	10020.0
5005.	Dealared duplicate reaction	J./JETIJ	0.1	T0300.3	3910.	pencio-penio-chiotenzo	2.U/LTII	0.0	16040 0
2000	Dectated dupticate feaction	2 (75.02	2 1	E242 0	3917.	pencio-nc4n9cno+n	4.38E+U9	0.0	15040.0
3064.	pentron+n=pentron-o+nz	3.0/E+U3	3.1	5343.0	3918.	pencion-i=nc4n9cno+n	5.0UE+40	-0.0	43060.0
2005	Deciared duplicate reaction	1 (2011)	0 0	10074 5	3919.	pention-i=nc3n/+c2n3on	4.655+29	-5.1	34449.8
3865.	pention+n=pention-p+n2	1.038+14	υ.υ	136/4.5	3920.	pention-i=pentienioi+n	1.04E+44	-9./	4/660.0
2255	Declared duplicate reaction			1	3921.	pention-i=pc4h9+ch2o	1.25E+34	-/.0	3/430.0
3866.	pention+o=pentio+oh	1.46E-03	4.7	1727.0	3922.	pention-2=c5h10-1+oh	2.71E+35	-7.0	33670.0
3867.	pention+o=pention-1+oh	1.45E+05	2.5	876.0	3923.	pentlon-2=c2h5+proloh2d	1.14E+42	-9.0	40400.0
3868.	pentloh+o=pentloh-2+oh	1.44E+05	2.6	3029.0	3924.	pentloh-2=pentlenlol+h	1.26E+46	-10.4	46160.0
3869.	pention+o=pention-3+oh	3.90E+13	0.0	5200.0	3925.	pention-2=pent2en1o1+h	3.47E+50	-11.9	51010.0

3926.	pentloh-3=c4h8-1+ch2oh	7.14E+41	-8.8	39070.0
3927.	pentloh-3=ch3+c4h73dloh	8.40E+44	-9.8	42470.0
3928.	pent1oh-3=pent2en1ol+h	3.95E+53	-12.7	51400.0
3929.	pent1oh-3=pent3en1ol+h	1.74E+52	-12.4	50630.0
3930.	pent1oh-4=c3h6+pc2h4oh	1.74E+50	-11.4	40710.0
3931	pentloh-4=pent3enlol+h	1 19E+57	-14 0	49340 0
3932	pention-4=pent4eniol+h	1 07E+59	-14 4	51810 0
2022.	pontion i pontionioi n	9 26E+39	_7 0	30240 0
3031	pention-5-c2n4+pioion-5	2 05F±46	-10 4	19790 0
3035	pentioni-J-pentienioi+n	2.90E+40 5.40E+04	2 5	-1900.0
2026	pentienioi+n-pentioniu-s+nz	3.40E+04	2.0	1520.0
3930.	pentienioi+on=pentionia-3+n20	3.00E+06	2.0	-1520.0
3937.	pentienioi+noz=pentionid=3+nzoz	6.40E+03	2.0	12400.0
3938.	pentienioi+cn3=pentionid=3+cn4	1.00E+11	0.0	1300.0
3939.	pent2eni01+n=pent1on1a-3+n2	5.40E+04	2.5	-1900.0
3940.	pent2en101+on=pent1on1d-3+n20	3.00E+06	2.0	-1520.0
3941.	pent2en101+ho2=pent1oh1d-3+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
3942.	pent2en101+ch3=pent1oh1d-3+ch4	1.00E+11	0.0	/300.0
3943.	pent2en1o1+h=pent1oh2d-4+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
3944.	pent2en1ol+oh=pent1oh2d-4+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
3945.	pent2en1o1+ho2=pent1oh2d-4+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
3946.	pent2en1ol+ch3=pent1oh2d-4+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3947.	pent3en1ol+h=pent1oh2d-4+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
3948.	pent3en1ol+oh=pent1oh2d-4+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
3949.	pent3en1ol+ho2=pent1oh2d-4+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
3950.	pent3en1ol+ch3=pent1oh2d-4+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3951.	pent3en1ol+h=pent1oh3d-5+h2	1.74E+04	2.5	2510.0
3952.	pent3en1ol+oh=pent1oh3d-5+h2o	3.00E+06	2.0	-298.0
3953.	pent3en1ol+ho2=pent1oh3d-5+h2o2	9.60E+03	2.6	13900.0
3954.	pent3en1ol+ch3=pent1oh3d-5+ch4	2.22E+00	3.5	5670.0
3955.	pent4en1ol+h=pent1oh3d-5+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
3956.	pent4en1ol+oh=pent1oh3d-5+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
3957.	pent4en1ol+ho2=pent1oh3d-5+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
3958.	pent4en1ol+ch3=pent1oh3d-5+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3959.	pentlen1ol=>nc4h9cho	9.66E+23	-3.3	59987.5
3960.	pentlohld-3+ho2=c2h5cho+c2h2oh+oh	4.50E+12	0.0	0.0
3961.	pent1oh2d-4+ho2=ch3cho+c2h2+ch2oh+oh	4.50E+12	0.0	0.0
3962.	pentloh2d-4+ho2=sc3h5cho+ch2oh+oh	4.50E+12	0.0	0.0
3963.	pent1oh3d-5+ho2=c2h3cho+pc2h4oh+oh	4.50E+12	0.0	0.0
3964.	pent1oh2d-4=c5h813+oh	7.40E+12	0.0	27350.0
3965.	pent1oh3d-5=c4h6+ch2oh	1.30E+13	0.0	34000.0
3966.	pent1en1o1+oh=nc3h7cho+ch2oh	1.37E+12	0.0	-1040.0
3967.	pent2en1o1+oh=c2h5cho+pc2h4oh	1.37E+12	0.0	-1040.0
3968.	pent.3en1ol+oh=ch3cho+pro1oh=3	1.37E+12	0.0	-1040.0
3969.	pent4en1ol+oh=ch2o+pc4h8oh-4	1.37E+12	0.0	-1040.0
3970	c4h73d1oh+h=hoc4h6+h2	5 40E+04	2 5	-1900 0
3971	c4h73d1oh+oh=hoc4h6+h2o	3 00E+06	2 0	-1520 0
3972	c4h73d1oh+ho2=hoc4h6+h2o2	6 40E+03	2.6	12400 0
3973	c4h73d1oh+ch3=hoc4h6+ch4	1 00E+11	0.0	7300.0
3974	$nc4h9cho(+m) \leq > ch3+c3h6cho-4(+m)$	3 79E+24	-2.2	88070 0
00/11	Low pressure limit: $0.17820E+61 = 0.12280E+02$	0 83980E+0	5	00070.0
	TROE contoring: 0.23520E+00 0.72400E+02	0.50000E+1	0 0 5 0 1	000 ⊽ ±10
2075	no/b@cbc(+m) <=>a2b5+pa2b4cbc(+m)	5 53E+24	-2 2	90010 0
5975.	1041190110(+10) < ->02113+p021140110(+10)	0.047205101	-2.2	09010.0
	TROE contoring. 0.24200E.00.0.7440(E.02)	0.04/205+0		00F+10
2076	$1 \times 10^{-1} \text{ Centerring}$: $0.24300 \pm 100 0.74400 \pm 103$	5 5201000	-2 2	90010 0
2310.	Teve processing limite 0 (C220RLC0 0 12120RL00	0.047007-01	-2.2	09010.0
	The pressure limit: U.0032UE+00 -U.1213UE+U2	0.84/20E+U	0 0 5 0 5	2000.10
2077	INUE CENTERING: 0.24380E+00 0.74406E+03	0.30000E+L	0.50	JUUETIU 70100 0
3911.	пс4пэспо-рс4пэ+псо	0.UUE+14	0.0	/ATOO'O

3978.	nc4h9cho=nc4h9co+h	5.00E+15	0.0	85000.0
3979.	nc4h9cho=c4h8cho-2+h	5.00E+15	0.0	94990.0
3980.	nc4h9cho=c4h8cho-3+h	5.00E+15	0.0	94990.0
3981.	nc4h9cho=c4h8cho-4+h	5.00E+15	0.0	94990.0
3982.	nc4h9cho=c4h8cho-5+h	8.00E+15	0.0	98000.0
3983.	nc4h9cho+o2=nc4h9co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
3984.	nc4h9cho+h=nc4h9co+h2	8.46E+05	2.3	1545.0
3985.	nc4h9cho+h=c4h8cho-2+h2	3.06E+04	2.8	3473.3
	Declared duplicate reaction			
3986.	nc4h9cho+h=c4h8cho-2+h2	5.73E+13	0.1	10568.9
	Declared duplicate reaction			
3987.	nc4h9cho+h=c4h8cho-3+h2	3.06E+04	2.8	3473.3
	Declared duplicate reaction			
3988.	nc4h9cho+h=c4h8cho-3+h2	5.73E+13	0.1	10568.9
	Declared duplicate reaction			
3989.	nc4h9cho+h=c4h8cho-4+h2	3.06E+04	2.8	3473.3
	Declared duplicate reaction			
3990.	nc4h9cho+h=c4h8cho-4+h2	5.73E+13	0.1	10568.9
	Declared duplicate reaction			
3991.	nc4h9cho+h=c4h8cho-5+h2	3.67E+03	3.1	5343.0
	Declared duplicate reaction			
3992.	nc4h9cho+h=c4h8cho-5+h2	1.63E+14	0.0	13674.5
	Declared duplicate reaction			
3993.	nc4h9cho+o=nc4h9co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
3994.	nc4h9cho+oh=nc4h9co+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0
3995.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-2+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
3996.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-3+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
3997.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-4+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
3998.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-5+h2o	5.25E+09	1.0	1590.0
3999.	nc4h9cho+ho2=nc4h9co+h2o2	3.10E+12	0.0	11920.0
4000.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-2+h2o2	5.60E+12	0.0	17690.0
4001.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-3+h2o2	5.60E+12	0.0	17690.0
4002.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-4+h2o2	5.60E+12	0.0	17690.0
4003.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-5+h2o2	8.50E+12	0.0	20440.0
4004.	nc4h9cho+ch3=nc4h9co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
4005.	nc4h9cho+ch3=c4h8cho-2+ch4	2.70E+04	2.3	7287.0
4006.	nc4h9cho+ch3=c4h8cho-3+ch4	2.70E+04	2.3	7287.0
4007.	nc4h9cho+ch3=c4h8cho-4+ch4	2.70E+04	2.3	7287.0
4008.	nc4h9cho+ch3=c4h8cho-5+ch4	4.50E-02	3.6	7154.0
4009.	nc4h9cho+ch3o=nc4h9co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
4010.	nc4h9cho+ch3o2=nc4h9co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
4011.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-5+ch3o2h	6.03E+12	0.0	19380.0
4012.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-4+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
4013.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-3+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
4014.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-2+ch3o2h	9.63E+03	2.6	11510.0
4015.	c4h8cho-2=nc4h9co	3.56E+10	0.9	37300.0
4016.	c4h8cho-3=nc4h9co	3.80E+10	0.7	32100.0
4017.	c4h8cho-4=nc4h9co	7.85E+11	-0.1	16800.0
4018.	c4h8cho-5=nc4h9co	3.67E+12	-0.6	7090.0
4019.	c4h8cho-2=c2h3cho+c2h5	2.00E+13	0.0	28700.0
4020.	nc4h9co=>pc4h9+co	5.78E+14	0.0	16843.5
4021.	ch3+ac3h5cho=c4h8cho-3	1.76E+04	2.5	6130.0
4022.	c4h8-1+hco=c4h8cho-3	1.28E+02	2.9	6728.4
4023.	c3h6+ch2cho=c4h8cho-4	1.88E+02	3.1	3660.0
4024.	c2h4+pc2h4cho=c4h8cho-5	1.32E+04	2.5	6130.0
4025.	c4h8cho-2+o2=c4h8cho-2o2	2.01E+31	-6.0	5209.0
4026.	c4h8cho-3+o2=c4h8cho-3o2	2.01E+31	-6.0	5209.0
4027.	c4h8cho-4+o2=c4h8cho-4o2	2.01E+31	-6.0	5209.0

4028.	c4h8cho-5+o2=c4h8cho-5o2		2.54E+55	-13.3	16300.0
4029.	c4h8cho-2o2=c4h8co-2o2h		1.92E+07	1.5	16600.0
4030.	c4h8cho-3o2=c4h8co-3o2h		9.34E+07	1.1	6600.0
4031.	c4h8cho-4o2=c4h8co-4o2h		1.46E+06	1.4	8500.0
4032.	c4h8cho-5o2=c4h8co-5o2h		1.46E+06	1.4	8500.0
4033	c4h8co-2o2h=co+nc3h7cho+oh		1 83E+15	-0.7	12910 0
4034	c4h8co-3o2h=co+c4h82ooh1i		1 83E+15	-0.7	12910 0
4035	c4h8co-4o2h=co+c4h82ooh4j		1 83F+15	-0.7	12910.0
4026	a/h ² ao_5o ² h=co/c410200114j		1 020115	0.7	12010.0
4030.	$c_{110}c_{0} = 5 + c_{10}^2 = c_{10}^2 + c_{110}^2 = 0$		1 505110	-0.7	5000 0
4037.	c4118C110-5+02-c411/C110-4+1102		1.JOETIZ	0.0	5000.0
4030.	C4118C110-4+02=C411/C110-4+1102		6.90E+11	0.0	3000.0
4039.	C4n/cno-4+n=C4n/co+n2		4.00E+13	0.0	4200.0
4040.	c4n/cno-4+o=c4n/co+on		5.00E+12	0.0	1/90.0
4041.	c4h/cho-4+oh=c4h/co+h2o		2.69E+10	0.8	-340.0
4042.	c4h7cho-4+ho2=c4h7co+h2o2		2.80E+12	0.0	13600.0
4043.	c4h7cho-4+ch3=c4h7co+ch4		1.70E+12	0.0	8440.0
4044.	c4h7cho-4+h=c4h7coally+h2		5.40E+04	2.5	-1900.0
4045.	c4h7cho-4+o=c4h7coally+oh		8.80E+10	0.7	3250.0
4046.	c4h7cho-4+oh=c4h7coally+h2o		3.00E+06	2.0	-1520.0
4047.	c4h7cho-4+ho2=c4h7coally+h2o2		6.40E+03	2.6	12400.0
4048.	c4h7cho-4+ch3=c4h7coally+ch4		1.00E+11	0.0	7300.0
4049.	c4h8co+h=>pc4h9+co		4.40E+12	0.0	1459.0
4050.	c4h8co+oh=>pc4h9+co2		3.73E+12	0.0	-1010.0
4051.	c4h8co+o=>c4h8-1+co2		3.20E+12	0.0	-437.0
4052.	c4h7coallv=>c4h6+hco		2.00E+13	0.0	50000.0
4053.	pent2oh=c5h10-1+h2o		4.80E+04	2.6	61630.0
4054.	pent2oh=t2c5h10+h2o		2.20E+04	2.6	62480.0
4055	pent2oh=c2c5h10+h2o		1.10E+04	2.6	62250.0
4056	pent2oh=nc3h7coch3+h2		5 00E+13	0 0	69500 0
4057	$pent2oh(+m) \leq >ch3+sc4h8oh-4(+m)$		1 10F+26	-2.8	92354 0
4057.	Low processor limit. 0 15222EL95	-0 101660+02	0 10467010	6	52554.0
	TDOE contoring. 0.42546E-01	-0.19100E102	0.1040/E10	0 0 0 0 0 0	241104
1050	IROE Centering: 0.42346E-01	0.2//JIE+03	0.33002ETU	0.213	07207 0
4058.	pent2on(+m) <=>c2n5+pro2on-1(+m)	0 000047.00	6.91E+26	-2.1	8/20/.0
	Low pressure limit: 0.6/084E+90	-0.20364E+02	0.99453E+0	5	
	TROE centering: 0.55845E-02	0.35820E+03	0.49325E+C	0.24/	61E+04
4059.	pent2oh(+m) <=>nc3h/+ch3choh(+m)		6.91E+26	-2.7	86207.0
	Low pressure limit: 0.67084E+90	-0.20364E+02	0.99453E+0	5	
	TROE centering: 0.55845E-02	0.35820E+03	0.49325E+C	0.247	61E+04
4060.	pent2oh(+m)<=>ch3+pc4h8oh-1(+m)		8.50E+24	-2.5	88444.0
	Low pressure limit: 0.99116E+86	-0.19664E+02	0.10120E+0	6	
	TROE centering: 0.39928E+00	0.21747E+03	0.46557E+0	0.228	841E+04
4061.	pent2oh(+m)<=>oh+c5h11-2(+m)		6.43E+22	-1.9	96229.0
	Low pressure limit: 0.19022E+79	-0.17503E+02	0.10835E+0	6	
	TROE centering: 0.86766E-04	0.29341E+03	0.19749E+0	0.167	46E+04
4062.	pent2oh(+m)<=>h+pent2oh-1(+m)		1.33E+16	0.0	102430.0
	Low pressure limit: 0.52180E+67	-0.14289E+02	0.11384E+0	6	
	TROE centering: 0.89358E-01	0.33651E+03	0.78352E+1	0 0.166	532E+04
4063.	$pent2oh(+m) \leq >h+pent2oh-2(+m)$		8.86E+18	-0.8	94238.0
	Low pressure limit: 0.64242E+76	-0.16831E+02	0.10646E+0	6	
	TROE centering: 0.10896E+00	0.86767E+02	0.57087E+1	0 0.243	392E+04
4064	$pent2oh(+m) \leq >h+pent2oh-3(+m)$		3.63E+20	-1.3	102100.0
	Low pressure limit. 0 27063E+72	-0 15706E+02	0 11357E+0	6	102100.0
	TROF centering: 0.18033E+00	0.27439E+03	0.10791E+0	0 214	1805+04
4065	nent20h $(+m) \leq >h+nent20h-4 (+m)$	0.2/3000000	3 63E+20	-1 3	102100 0
1000.	Low pressure limit. 0 27063E172	-0 15706F+02	0 113570±0	±.5	102100.0
	TROF centering. 0.19022E+00	0.274305+02	0 107010+0	0 0 0 0 1 1	1805+04
1066	1000 concerning, 0.10033E+00	0.2/40955700	1 310191670	0 0 0	101830 0
4000.	Low processo limit: 0 174145-60	-0 144240.00	1.316710 0 113355740	6	T0T030.0
	LOW Pressure rimit: 0.1/414E+68	-0.144345+UZ	0.113338+0	0	

4067.	<pre>pent2oh(+m)<=>h+pent2o(+m) Low pressure limit: 0.85970E+63 -0.13509E+02</pre>	2.20E+14 0.11589E+06	0.2	104850.0
	TROE centering: 0.48822E+00 0.27191E+02	0.21032E+11	0.22	461E+07
4068.	pent2oh+o2=ho2+pent2oh-1	3.00E+13	0.0	52340.0
4069.	pent2oh+o2=ho2+pent2oh-2	1.00E+13	0.0	46800.0
4070.	pent2oh+o2=ho2+pent2oh-3	2.00E+13	0.0	49800.0
4071.	pent2oh+o2=ho2+pent2oh-4	3.00E+13	0.0	52340.0
4072.	pent2oh+o2=ho2+pent2oh-5	3.00E+13	0.0	52340.0
4073	pent2oh+o2=ho2+pent2o	1.00E+13	0.0	56340.0
4074	pent2oh+h=pent2o+h2	9.46E+02	3.1	8701.0
4075	pent2oh+h=pent2oh-1+h2	5.31E+04	2.8	7495.0
4076	pent2oh+h=pent2oh-2+h2	4 40E+04	27	2915 0
4077	pent2oh+h=pent2oh-3+h2	1 08E+05	27	4440 0
4078	pent2oh+h=pent2oh-4+h2	3 06E+04	28	3473 3
10/0.	Declared duplicate reaction	3.000.001	2.0	01/0.0
4079	pont2ohth=pont2oh=4th2	5 73〒+13	0 1	10568 9
4075.	Pealered duplicate reaction	5.750115	0.1	10000.0
4080.	pent2oh+h=pent2oh-5+h2	3.67E+03	3.1	5343.0
	Declared duplicate reaction			
4081.	pent2oh+h=pent2oh-5+h2	1.63E+14	0.0	13674.5
1082	Declared duplicate reaction	1 /603	17	1727 0
4002.	pent2oh+o=pent2o+oh	0.010+05	2.1	1727.0
4003.	pent2on+o=pent2on=1+on	9.01E+03	2.4	4730.0
4004.	pent2on+o=pent2on-2+on	1.23E+04	2.5	070.0
4000.	pent2on+o=pent2on-o+on	1.44E+04	2.0	5029.0
4086.	pent2on+o=pent2on-4+on	3.90E+13	0.0	5200.0
4087.	pent2on+o=pent2on-5+on	5.10E+13	0.0	/850.0
4088.	pent2on+on=pent2o+n2o	7.90E+06	1.0	-461.0
1080	pertared dupitcate reaction	1 600+03	2 9	53 0
4000.	Declared duplicate reaction	1.000100	2.9	55.0
4090	nent2oh+oh=nent2oh-1+h2o	2 375+10	0 9	5350 0
4000.	Declared duplicate reaction	2.3/11/10	0.5	5550.0
1001	pertared dupitcate reaction	9 622405	1 0	-830 7
4091.	Pealened duplicate reaction	9.026105	1.9	-050.7
1092	pont2ohtoh=pont2oh=2th2o	7 185+05	2 2	-1537 7
4092.	pent2oh+oh=pent2oh=2+h2o	2 01E+02	2.2	-2061 2
4093.	pent2oh+oh=pent2oh=4+h2o	7 05E+00	2.0	-2001.2
4094.	pent2oh+oh=pent2oh=5+h2o	1 27E+07	1 0	060 2
4095.		1.3/ETU/	1.0 E 2	10520 0
4090.	pent2oh+ho2-pent2o+h2o2	0.4/E-0/	5.5	14071 0
4097.	pent2oh+ho2-pent2oh-1+h2o2	1.00E-0J	J.I 2 E	14071.0
4090.	pent201+102=pent201-2+1202	0.60E+00	3.5	9732.0
4099.	pent2on+no2=pent2on-3+n2o2	1.50E-02	4.3	13076.0
4100.	pent2on+no2=pent2on-4+n2o2	6.IUE-UI	3.1	13627.0
4101.	pent2on+no2=pent2on-5+n2o2	1.76E+UZ	3.2	1/19/.0
4102.	pent2on+cn3=pent2o+cn4	1.02E+00	3.0	8221.0
4103.	pent2on+cn3=pent2on-1+cn4	5.40E+02	3.0	10900.0
4104.	pent2on+cn3=pent2on-2+cn4	1.32E+U3	2.9	5730.0
4105.	pent2on+cn3=pent2on-3+cn4	9.20E+02	2.9	8/90.0
4106.	pent2oh+ch3=pent2oh-4+ch4	2.00E+11	0.0	9600.0
410/.	pent2on+cn3=pent2on-5+ch4	3.00E-01	4.0	8200.0
4108.	pent2on-1=pent2o	8.1/E+06	0.0	23290.0
4109.	pent2on-2=pent2on-1	8.11E+24	-4.6	33894.7
4110.	pent2on-2=pent2on-3	2.39E+21	-3.5	38810.4
4111.	pent2on-2=pent2on-4	4.14E+10	-0.6	29986.9
4112.	pent2oh-2=pent2oh-5	4.26E+12	-0.9	21636.3
4113.	pent2oh-2=pent2o	3.40E+08	0.0	22970.0

4114. pent2oh-3=pent2oh-1	1.78E+10	-0.3	30960.0	4172 por	nt2on2ollah2=nont2oh2d_5lah4	2 220,00	2 5	5670 0
4115. pent2oh-3=pent2oh-4	1.36E+18	-2.7	33373.7	4172. per	ntsenzo1+cns=pentzonsd-5+cn4	2.228+00	3.5	5670.0
4116. pent2oh-3=pent2oh-5	9.13E+06	0.5	29020.6	4173. per	nt4en2o1+h=pent2oh3d-5+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
4117 pent2oh-3=pent2o	8 17E+06	0 0	23290 0	41/4. per	nt4en2o1+oh=pent2oh3d-5+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4118. $pent2oh-4=pent2oh-1$	2.82E+13	-1.2	21665.5	4175. per	nt4en2o1+ho2=pent2oh3d-5+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
4119 pent2oh-4=pent2oh-5	3 005+20	-3 3	32687 7	4176. per	nt4en2o1+ch3=pent2oh3d-5+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4120 pont2oh 4-pont2o	1 885+07	0.0	16680 0	4177. c4h	h7ldloh+h=c4h6ldloh3+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
4120. pent2oh 4-pent2oh 1	1 020112	1 1	12646 2	4178. c4h	h7ldloh+oh=c4h6ldloh3+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4121. pent2on-J-pent2on-1	1 420-00	-1.1	12040.3	4179. c4h	h71d1oh+ho2=c4h61d1oh3+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
4122. pent20n-5=pent20	1.42E+09	0.0	9106.0	4180. c4h	h7ldloh+ch3=c4h6ldloh3+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4123. pent20+02=nc3n/cocn3+no2	2.14E+10	0.0	1100.0	4181. c4h	h73d2oh+h=c4h63d2oh2+h2	2.50E+04	2.5	-2790.0
4124. pent2oh-2+o2=nc3h7coch3+ho2	1.50E+18	-1.8	1120.0	4182. c4h	h73d2oh+oh=c4h63d2oh2+h2o	1.30E+06	2.0	-2620.0
4125. pent2oh-1+o2=pent1en2o1+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0	4183. c4h	h73d2oh+ho2=c4h63d2oh2+h2o2	1.60E+04	2.6	10900.0
4126. pent2oh-2+o2=pent1en2ol+ho2	6.90E+11	0.0	5000.0	4184. c4h	h73d2oh+ch3=c4h63d2oh2+ch4	5.00E+10	0.0	5600.0
4127. pent2oh-2+o2=pent2en2ol+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	4185. c4h	h71d1oh=>nc3h7cho	9.66E+23	-3.3	59987.5
4128. pent2oh-3+o2=pent2en2ol+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0	4186. per	ntlen2ol=>nc3h7coch3	9.66E+23	-3.3	59987 5
4129. pent2oh-3+o2=pent3en2ol+ho2	7.90E+11	0.0	5000.0	4187 per	$nt^2en^2ol=>nc^3h^2coch^3$	9 66E+23	-3 3	59987 5
4130. pent2oh-4+o2=pent3en2ol+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	4199 por	$p \pm 2ch1d = 3 \pm bc2 = c2b5cbc \pm c2b2cb \pm cb$	4 508+12	0.0	0.0
4131. pent2oh-4+o2=pent4en2ol+ho2	6.90E+11	0.0	5000.0	4100. per	$r + 2ch^2 d - 4 + hc^2 - ch^2 ch c + a^2 h - r + ch + ch$	4.505112	0.0	0.0
4132. pent2oh-5+o2=pent4en2ol+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0	4109. per	p + 2ph 2d - 5 + ho 2 = c + 2ph 2 c ho + c + 2ph 2d - 5 + ho 2 = c + 2ph 2 c ho + c + 2ph 2d - b + c h	4.50E112	0.0	0.0
4133. pent2o=nc3h7cho+ch3	2.67E+11	0.0	10820.0	4190. per	h(1d1 + h) + h = 2 + h = 2 + h = 1 + h = 2 + h = 1 + h = 2 +	4.50E+12 4.50E+12	0.0	0.0
4134. pent2o=ch3cho+nc3h7	2.67E+11	0.0	10820.0	4191. C41	h(2) + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 + 2 +	4.50E+12	0.0	15000.0
4135. pent2oh-1=c5h10-1+oh	4.70E+27	-4.6	32703.1	4192. C4r		1.50E+11	0.0	15200.0
4136. pent2oh-1=nc3h7+c2h3oh	7.24E+28	-4.9	35257.5	4193. C4r	n63d2on2=c2n3cocn3+n	1.89E+06	2.1	28289.0
4137 pent2ob-1=pent1ep2o1+h	6 30E+45	-10 4	46160 0	4194. per	nt2oh3d-5=c5h813+oh	7.40E+12	0.0	27350.0
4138 pent2oh-2=pc3b7coch3+b	7 68F+26	-4 5	34620 4	4195. per	nt2oh3d-5=ac3h5cho+ch3	7.40E+12	0.0	24350.0
$4130 \text{pent2oh} = 2 = a^2 b^2 + pro^2 o^2 h^2 d$	/ 65E+20	-4.5	34020.4	4196. per	nt4en2ol+oh=sc4h8oh-4+ch2o	1.37E+12	0.0	-1040.0
4140 pent2eh 2=pent1ep2el/h	1 070150	14 4	51910 0	4197. per	nt2en2ol+oh=c2h5cho+ch3choh	1.37E+12	0.0	-1040.0
4140. pent2on-z-pent1en2o1+n	1.076+39	-14.4	47660.0	4198. per	nt3en2ol+oh=ch3cho+pro2oh-1	1.37E+12	0.0	-1040.0
4141. pent2on-2=pent2en2o1+n	1.04E+44	-9.7	4/660.0	4199. per	ntlen2ol+oh=ch2o+pc4h8oh-1	1.37E+12	0.0	-1040.0
4142. pent2on-3=t2c5h10+on	3.91E+24	-3.9	30587.5	4200. c4h	h71d1oh+oh=c2h5cho+ch2oh	1.37E+12	0.0	-1040.0
4143. pent2on-3=c2c5h10+on	3.91E+24	-3.9	31387.5	4201. c4h	h73d2oh+oh=pro2oh-1+ch2o	1.37E+12	0.0	-1040.0
4144. pent2oh-3=c4h/ldloh+ch3	5.14E+27	-4.7	36714.5	4202. c4h	h73d2oh+oh=ch3cho+ch3choh	1.37E+12	0.0	-1040.0
4145. pent2oh-3=c4h73d2oh+ch3	5.79E+26	-4.3	35370.3	4203. c4h	h71d1oh+h=c2h3oh+c2h5	4.31E+22	-2.7	9830.2
4146. pent2oh-3=pent2en2ol+h	6.30E+45	-10.4	46160.0	4204. c4h	h73d2oh+h=ch3choh+c2h4	4.31E+22	-2.7	9830.2
4147. pent2oh-3=pent3en2ol+h	1.74E+52	-12.4	50630.0	4205. c41	h73d2oh+h=t2c4h8+oh	4.31E+22	-2.7	9830.2
4148. pent2oh-4=c3h6+ch3choh	1.65E+29	-5.0	33140.8	4206 64	h73d2oh+h=c2c4h8+oh	4 31E+22	-2.7	9830.2
4149. pent2oh-4=pent3en2ol+h	1.19E+57	-14.0	49340.0	4207 nc3	$3h7coch3+h\leq=>nc3h7+ch3cho$	3 55E+12	-0 1	7920 7
4150. pent2oh-4=pent4en2ol+h	1.07E+59	-14.4	51810.0	4208 nc3	3h7coch3+h<=>nc3h7cho+ch3	9 98E+10	0.1	9474 7
4151. pent2oh-5=c2h4+pro2oh-1	3.95E+28	-4.8	34441.1	4200. 1100	3h7coch3+ch=prcoch3-1+h2c	1 375+07	1.9	969 3
4152. pent2oh-5=pent4en2ol+h	2.95E+46	-10.4	48780.0	4209. 110	3h7coch3+oh=prcoch3-2+h2o	7 058-09	1.0	504.7
4153. pentlen2ol+h=pent2oh1d-3+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0	4210. 110.	$2h7aaah^2 + ah=prcoch3 - 2+h2a$	2 261102	2 1	2050 0
4154. pentlen2ol+oh=pent2oh1d-3+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0	4211. 110.	2h7 h 2 h 2h7 h 2 - h 2	2.30E+02	3.1 2.1	-3030.0
4155. pentlen2ol+ho2=pent2oh1d-3+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0	4212. 1103		3.99E+U2	3.1	-944.0
4156. pentlen20l+ch3=pent2oh1d-3+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0	4213. nc3	3n/cocn3+n=prcocn3-1+n2	6.66E+U5	2.5	6/56.0
4157. pent2en2ol+h=pent2oh1d-3+h2	1.74E+04	2.5	2510.0	4214. nc3	3n/cocn3+n=prcocn3-2+n2	1.30E+06	2.4	44/1.0
4158 pent2en2ol+oh=pent2oh1d-3+h2o	3.00E+06	2.0	-298.0	4215. nc.	3h/coch3+h=prcoch3-3+h2	1.99E+06	2.3	4083.8
4159 pent2en2ol+bo2=pent2oh1d=3+b2o2	9 60E+03	2.6	13900 0	4216. nc3	3h7coch3+h=nc3h7coch2+h2	1.20E+07	2.2	6937.8
4160 pont2on2o1+ch3=pont2oh1d=3+ch4	2 225+00	3 5	5670 0	4217. nc3	3h7coch3+ch3=prcoch3-1+ch4	1.53E+00	3.6	7154.0
4160. $pent2en201+b=pent2eh2d=4+b2$	2.22ET00 5.40E±04	2.5	-1900.0	4218. nc3	3h7coch3+ch3=prcoch3-2+ch4	2.27E+00	3.5	5481.0
4161. pent2en201 in-pent2on2u-4/hz	2 000104	2.5	1520.0	4219. nc3	3h7coch3+ch3=prcoch3-3+ch4	2.00E+00	3.4	6858.1
4162. pent2en2ol+bn2_ment2eh2d 4/h2e2	5.00E+00	2.0	-1320.0	4220. nc3	3h7coch3+ch3=nc3h7coch2+ch4	2.04E+01	3.4	9356.1
4103. pentzenzol+noz=pentzonza-4+nzoz	0.40±+03	2.0	12400.0	4221. nc3	3h7coch3+ho2=prcoch3-1+h2o2	2.04E+01	3.6	17161.0
4104. pentzenzoi+ch5=pentzonza-4+ch4	1.005+11	0.0	/300.0	4222. nc3	3h7coch3+ho2=prcoch3-2+h2o2	6.32E+01	3.4	13719.0
4165. pent3en201+n=pent20h2d-4+h2	∠.50E+04	2.5	-2/90.0	4223. nc3	3h7coch3+ho2=prcoch3-3+h2o2	3.56E-01	3.7	13098.0
4166. pent3en201+oh=pent2oh2d-4+h2o	1.30E+06	2.0	-2620.0	4224. nc3	3h7coch3+ho2=nc3h7coch2+h2o2	4.14E-02	4.1	16252.0
416/. pent3en201+ho2=pent2oh2d-4+h2o2	1.60E+04	2.6	10900.0	4225. nc3	3h7coch3+ch3o2=prcoch3-1+ch3o2h	3.01E+12	0.0	19380.0
4168. pent3en2o1+ch3=pent2oh2d-4+ch4	5.00E+10	0.0	5600.0	4226. nc3	3h7coch3+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. nc3	3h7coch3+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 nc	3h7coch3+ch3o2=nc3h7coch2+ch3o2h	3.01E+12	0.0	17580.0
4171. pent3en2ol+ho2=pent2oh3d-5+h2o2	9.60E+03	2.6	13900.0	4229. pro	coch3-2=c3h6+ch3co	2.72E+16	-1.1	25590.0

4230.	prcoch3-3=c2h3coch3+ch3	1.05E+11	0.7	30583.0	4286.	c2h5coc2h5(+M)=c2h5+c2h5
4231.	prcoch3-3=c2h5chco+ch3	1.56E+20	-1.8	49167.1		Low pressure limit: 0.5
4232.	prcoch3-1=c2h4+ch3coch2	2.90E+16	-1.2	27000.0		TROE centering: 0.9
4233.	nc3h7coch2=nc3h7+ch2co	1.70E+29	-4.8	42920.1		h2 Enhanced
4234.	pent3oh=t2c5h10+h2o	6.40E+04	2.6	62040.0		h2o Enhanced
4235.	pent3oh=c2c5h10+h2o	6.40E+04	2.6	62320.0		ch4 Enhanced
4236.	pent3oh=c2h5coc2h5+h2	5.00E+13	0.0	69500.0		co Enhanced
4237	ch3+sc4h8oh-1=pent3oh	1 93E+14	-0.3	0.0		co2 Enhanced
4238	$c^{2h5+proloh-1=pent3oh}$	1 36F+15	-0.7	0.0		c2h6 Enhanced
4230.	pont3oh_1+h=pont3oh	1 00E+14	0.7	0.0		ar Enhanced
4239.	pent3oh 21h=pent3oh	1 00E114	0.0	0.0		c2h2 Enhanced
4240.	pent3oh-2+h-pent3oh	1.00E+14	0.0	0.0		c2h4 Enhanced
4241.	pentson-s+n=pentson	1.UUE+14	0.0	0.0	4287.	c2h5coc2h5(+M) = ch3 + c2h5c
4242.	contraston=pencoon	2.41E+13	0.0	50240.0		Low pressure limit: 0.3
4243.	pent3on+o2=pent3on-1+no2	3.00E+13	0.0	52340.0		TROE centering: 0.
4244.	pent3oh+o2=pent3oh-2+ho2	2.00E+13	0.0	49800.0		h2 Enhance
4245.	pent3oh+o2=pent3oh-3+ho2	1.00E+13	0.0	46800.0		h2o Enhance
4246.	pent3oh+h=pent3oh-1+h2	7.35E+03	3.1	5343.0		ch4 Enhance
	Declared duplicate reaction					co Enhance
4247.	pent3oh+h=pent3oh-1+h2	3.26E+14	0.0	13674.5		co2 Enhance
	Declared duplicate reaction					c2h6 Enhance
4248.	pent3oh+h=pent3oh-2+h2	2.16E+05	2.7	4440.0		ar Enhance
4249.	pent3oh+h=pent3oh-3+h2	4.40E+04	2.7	2915.0		c2h2 Enhanced
4250.	pent3oh+oh=pent3oh-1+h2o	2.73E+07	1.8	868.3		c2h4 Enhanced
4251.	pent3oh+oh=pent3oh-2+h2o	7.82E+03	2.8	-2061.2	4288	$c^{2h5coc^{2h4p}=c^{2h5coc^{2h4s}}}$
4252.	pent3oh+oh=pent3oh-3+h2o	7.18E+05	2.2	-1537.7	4289	$c^{2h5+ch3chco=c^{2h5coc^{2h4s}}}$
4253.	pent3oh+ch3=pent3oh-1+ch4	6.00E-01	4.0	8200.0	1205.	$c^{2h5}c^{2h4}e^{(+M)} = c^{2h5}c^{2h4}e^{(+M)}$
4254	pent3oh+ch3=pent3oh-2+ch4	1.84E+03	2.9	8790.0	42.50.	Low pressure limit: 0
4255	pent3oh+ch3=pent3oh=3+ch4	6 60E+02	2 9	5730 0		h2 Enhance
4256	pent3oh+bo2=pent3oh=1+b2o2	1 22E+02	3.6	17160 0		h2o Enhance
4250.	pent3oh+ho2=pent3oh=2+h2o2	3 795+02	3.0	13720 0		ch4 Enhance
4237.	pent3oh+ho2-pent3oh-2+h2o2	1 257 05	5.4	13/20.0		co Enhance
4200.	pent3on+noz=pent3on-3+nzoz	1.23E-03	5.2	/408.0		co ² Enhance
4259.	$penuson+c_{2ns}=penuson-1+c_{2ns}$	6.00E-01	4.0	8200.0		c2b6 Enhance
4260.	pent3on+c2n5=pent3on-2+c2n6	1.84E+03	2.9	8/90.0	1291	c2h5coc2h4p=c2h5coc2h3+h
4261.	pent3on+c2n5=pent3on-3+c2n6	6.60E+02	2.9	5/30.0	1291.	$c^{2h5c0+c^{2h}+p-c^{2h5c0+c^{2h}+p-c$
4262.	pent3oh+c2h3=pent3oh-1+c2h4	6.00E-01	4.0	8200.0	1292.	$c_{2h5coc}^{2h5+o=c_{2h5coc}^{2h5+o=c_{2h5coc}^{2h5+o=c_{2h5coc}^{2h5+o=c_{2h5coc}^{2h5+o=c_{2h5coc}^{2h4}}}$
4263.	pent3oh+c2h3=pent3oh-2+c2h4	1.84E+03	2.9	8790.0	1293.	c2h5coc2h5+o=c2h5coc2h4
4264.	pent3oh+c2h3=pent3oh-3+c2h4	6.60E+02	2.9	5730.0	4205	22h5c0c2h5+ch2=c2h5c0c2h45
4265.	pent3oh+c3h5-a=pent3oh-1+c3h6	6.00E-01	4.0	8200.0	4295.	c2IIJC0C2IIJ+CIIJ=C2IIJC0C2II
4266.	pent3oh+c3h5-a=pent3oh-2+c3h6	1.84E+03	2.9	8790.0	4290.	c2IIJC0C2IIJ+CIIJ=C2IIJC0C2II
4267.	pent3oh+c3h5-a=pent3oh-3+c3h6	6.60E+02	2.9	5730.0	4297.	c2IIJC0C2IIJ+02=c2IIJC0C2II4
4268.	pent3oh-1=pro1oh-1+c2h4	4.24E+10	0.8	29211.0	4298.	c2IIJC0C2IIJ+02-C2IIJC0C2II4
4269.	pent3oh-2=t2c5h10+oh	1.00E+13	0.0	27000.0	4299.	c2IIJC0C2IIJ+II=C2IIJC0C2II4p
4270.	pent3oh-2=c2c5h10+oh	7.00E+12	0.0	27000.0	4300.	C2H5COC2H5+H=C2H5COC2H4S
4271.	pent3oh-2=c2h5+c2h5cho	2.00E+13	0.0	26700.0	4301.	C2II5COC2II5+C2II3=C2II5COC2
4272.	pent3oh-3=c2h5coc2h5+h	2.50E+13	0.0	29000.0	4302.	C2II5COC2II5+C2II5=C2II5COC2
4273.	pent3oh-3=c2h5coch3+ch3	4.00E+13	0.0	31000.0	4303.	22115C0C2115+C2115-C2115C0C2
4274.	pent3oh-3=pent3oh-1	4.14E+10	-0.6	29987.0	4304.	c2IIJC0C2IIJ+C2IIJ-C2IIJC0C2
4275	pent3oh-1=pent3oh-2	2 95E+31	-6.7	28450.0	4305.	C2II5COC2II5+CII30=C2II5COC2
4276	pent3oh-1+o2=pent3oh1d+ho2	1 58E+12	0.0	5000 0	4306.	$C_{211}C_{00}C_{211}C_{11}C_$
4277	pent 3oh-2+o2=pent 3oh1d+ho2	6 90E+11	0.0	5000.0	4307.	pc2n4coc2n3+n(+M)=c2n5cc
4278	pent 3 ob - 2 + o2 = c 2 b 5 c o c 2 b 5 + b o 2	4 50E+11	0.0	5000.0		Low pressure limit: 0.3
4270.	pent2oh 2/02-02150002115/1102	1 500111	1 0	1120.0		TRUE centering: 0.4
42/9.	pencoon-otoz-cznococznotnoz	1.000-14	-1.0	1120.0		h2 Enhanced
4200.	penconiu+n=pencon-i	1.00E+14	0.0	0.0		nzo Enhance
4281.	penusonia+on=penusonia-3+n2o	1.81E+U3	2.9	-2011.0		cn4 Enhance
4282.	pentsonia+n=pentsonid-3+h2	4.40E+04	2.7	2915.0		co Enhance
4283.	pent3oh1d+ch3=pent3oh1d-3+ch4	6.60E+02	2.9	5730.0		coz Enhance
4284.	pent3oh1d+ho2=pent3oh1d-3+h2o2	1.25E-05	5.2	7468.0		
4285.	pent3ohld-3=c2h5coc2h3+h	1.00E+13	0.0	41500.0	177	
					1 / /	

86.	c2h5coc2h5(+M)=c	2h5+c2h5co(+M)	05 −0 24670E+02	5.69E+19 - 0.10531E+06	-0.7	81910.0
	TROE centering: h2 h2 ch4 co co2 co2 c2h6 ar c2h2 c2h4	0.90000E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	00 0.10000E+11 2.000E+00 6.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 3.000E+00 7.000E-01 3.000E+00 3.000E+00	0.50000E+03	0.5000	0E+10
287.	c2h5coc2h5(+M)=	ch3+c2h5coch2 (+M	1)	2.55E+22	-1.4	86781.0
	Low pressure 11 TROE centering: h2 h2o ch4 co co2 c2h6 ar c2h2	mit: 0.31210+1(0.62000E+ Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	00 -0.25500E+02 00 0.15000E+04 2.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 3.000E+00 7.000E-01 3.000E+00	0.10528E+06 0.12000E+03	0.5000	D0E+10
	c2h4	Enhanced by	3.000E+00			
288. 289. 290.	c2h5coc2h4p=c2h5 c2h5+ch3chco=c2h c2h5coc2h4s(+M)= Low pressure lin h2 h2o ch4 co co2	5coc2h4s 15coc2h4s =c2h5coc2h3+h(+M mit: 0.46000E- Enhanced by Enhanced by Enhanced by Enhanced by	1) 36 0.15370E+02 2.000E+00 6.000E+00 2.000E+00 1.500E+00 2.000E+00 2.000E+00	6.87E+05 3.30E+02 4.70E+08 -0.60310E+03	1.6 2.7 1.3	17898.0 13952.0 44697.6
91	c_{2nb} $c_{2h5coc2h4p=c_{2h}}$	Ennanced by Scoc2h3+h	3.0008+00	2 48E+53 -	12 3	52000 0
292. 293. 294. 295. 296. 297. 298. 299. 801. 802. 803. 804. 805. 806.	22h5coc2h5+o=c2h c2h5coc2h5+o=c2h c2h5coc2h5+o=c2h c2h5coc2h5+ch3=c c2h5coc2h5+ch3=c c2h5coc2h5+cb3=c c2h5coc2h5+c2=c2 c2h5coc2h5+b=c2h c2h5coc2h5+b=c2h c2h5coc2h5+c2h3= c2h5coc2h5+c2h3= c2h5coc2h5+c2h3= c2h5coc2h5+ch3o= pc2h4coc2h3+h (+h Low pressure lin TROE centering: h2 ch4 co	bcoc2113+11 b5coc214p b5coc214p+ch4 b2b5coc214s+ch4 b2b5coc214s+ch4 b2b5coc214s+ch2 b5coc214s+ho2 b5coc214s+ho2 b5coc214s+ho2 b5coc214s+ho2 b5coc214s+ho2 b5coc214s+ho2 b5coc214s+ho2 b5coc214s+ho2 c2b5coc214s+c2h c2b5coc214s+cb3 4)=c2b5coc2h3(+M mit: 0.30100E+ 0.49800E+ Enhanced by Enhanced by	14 14 16 16 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10	2.48±+33 - 1.00E+11 1.96E+06 2.89E+11 9.06E-01 1.70E+01 6.00E+13 4.04E+13 9.98E+05 1.43E+05 1.43E+05 1.00E+12 6.00E+11 1.00E+11 6.00E+11 1.15E+12 3.60E+13 0.58336E+04 0.13140E+04	12.3 0.0 2.4 0.2 3.6 3.3 0.0 0.0 2.5 2.3 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0	32000.0 8720.0 4750.0 2970.0 7150.0 52300.0 45900.0 6760.0 2880.0 10400.0 5600.0 13400.0 8600.0 6460.0 4570.0 0.0

	c2h6	Enhanced by	3.000E+00			
	ar	Enhanced by	7.000E-01			
4308	c2h3coch2+ch3(+M	$() = c^{2}b^{5}c^{2}c^{2}b^{3}(+M)$		1 00E+14	-0.3	-262 3
1000.	Low pressure lin	nit: 0.39100E+6	, 1 -0.12810E+02	0.62500E+04	0.0	202.0
	TROE centering:	0.10400E+0	0 0.16060E+04	0.60000E+05	0.6118	34E+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 3.000E+00			
	ar	Enhanced by	7.000E-01			
4309.	pc2h4coc2h3=c2h3	coc2h3+h		2.48E+53 -	12.3	52000.0
4310.	c2h3co+c2h4=pc2h	4coc2h3		1.00E+11	0.0	8720.0
4311.	c2h3co(+M)=c2h3+	co (+M)		2.10E+13	0.0	14603.3
	Low pressure lin	nit: 0.43700E+1	6 0.00000E+00	0.10500E+05		
	TROE centering:	0.61730E+0	0 0.13076E+02	0.20780E+04	0.5093	30E+04
	nz h2o	Enhanced by	2.000E+00			
	n20	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			
	c2h2	Enhanced by	3.000E+00			
1212	CZR4	Enhanced by	3.000E+00	1 000+12	0 0	0.0
4312.	$sc^{2}h^{4}coc^{2}h^{3}(+M) =$)	4 70E+08	1 3	44697 6
1010.	Low pressure lin	nit: 0.46000E-3	, 6 0.15370E+02	-0.60310E+03	1.0	11057.0
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	co	Enhanced by	1.500E+00			
	C02	Enhanced by	2.000E+00 3.000E+00			
4314.	c2h3+ch3chco=sc2	h4coc2h3	5.0001100	3.30E+02	2.7	13952.0
4315.	c2h3coc2h3+h=c2h	3co+c2h2+h2		9.04E+16	-0.5	37738.0
4316.	c2h5+c2h3co=c2h5	coc2h3		3.13E+14	-0.5	0.0
4317.	c2h5co+c2h3=c2h5	coc2h3		3.13E+14	-0.5	0.0
4318.	c2h5co+c2h2=c2h5	coc2h2		1.00E+13	0.0	15000.0
4319.	c2h5coc2h3=ch3+c	2h3coch2		1.52E+24	-2.6	84100.0
4320.	c2h5coc2h3+h=sc2	h4coc2h3+h2		9 57E+05	2.3	2880 0
4322.	c2h5coc2h3+h=c2h	.5coc2h2+h2		1.54E+06	2.5	12200.0
4323.	c2h5coc2h3+oh=pc	2h4coc2h3+h2o		2.70E+00	3.8	-2900.0
4324.	c2h5coc2h3+oh=sc	2h4coc2h3+h2o		4.72E+02	3.1	-3050.0
4325.	c2h5coc2h3+oh=c2	h5coc2h2+h2o		1.01E+13	0.0	5960.0
4326.	c2h5coc2h3+ch3=p	c2h4coc2h3+ch4		4.53E-01	3.6	7150.0
4327. 4328	c2h5coc2h3+ch3=s	CZII4COCZII3+CII4		0.3∠±+UU 5.55F=01	3.3 3 7	5270.0 9500 0
4329.	c2h5coc2h3+ho2=p	c2h4coc2h3+h2o2		1.24E-04	4.9	14080.0
4330.	c2h5coc2h3+ho2=s	c2h4coc2h3+h2o2		1.68E-01	3.9	13390.0
4331.	c2h5coc2h3+ho2=c	2h5coc2h2+h2o2		5.65E+14	0.0	30400.0
4332.	c2h5coc2h3+ch3o=	pc2h4coc2h3+ch3	oh	2.17E+11	0.0	6460.0
4333.	c2h5coc2h3+ch3o=	sc2h4coc2h3+ch3	b	5.76E+11	0.0	4570.0
4334.	c2h5coc2h3+ch3o=	c2h5coc2h2+ch3o	n	2.24E+10	0.0	6750.0
4333. 1336	c2h5coc2h3+o=pc2	h4coc2h3+on		9.815+US 1 //F+11	2.4	4/30.0
-330.	C2113C0C2113+0=8C2	11700021137011		T.44D-TT	0.2	2910.0

4337.	c2h5coc2h3+o=c2h5coc2h2+oh	7.55E+06	1.9	3740.0
4338.	c2h5coc2h3+o2=pc2h4coc2h3+ho2	1.80E+14	0.0	52300.0
4339.	c2h5coc2h3+o2=sc2h4coc2h3+ho2	2.02E+13	0.0	45900.0
4340.	c2h5coc2h3+o2=c2h5coc2h2+ho2	2.00E+13	0.0	61500.0
4341.	c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4p+h2o	2.70E+00	3.8	-2900.0
4342.	c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4s+h2o	4.72E+02	3.1	-3050.0
4343	$c^{2h5}coc^{2h5}+ho^{2}=c^{2h5}coc^{2h4}p+h^{2}o^{2}$	1 24E-04	4 9	14080 0
4344.	c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4s+h2o2	1.68E-01	3.9	13390.0
4345	$c^{2h5coc}^{2h4s+o2} = c^{2h5coc}^{2h3+bo2}$	8 18E+16	-1 7	6964 0
4346	$c_{2h5coc}^{2h4p+o2} = c_{2h5coc}^{2h3+ho2}$	2 64F+00	3 5	2481 0
4347	$b_{11} = 2m^2 c_{11} = b_{11} = 2m^2 d_{11} = b_{11} = 2m^2 c_{11} = b_{11} = 2m^2 d_{11} = b_{11} = b_{11} = 2m^2 d_{11} = b_{11} $	1 805+20	-5.0	23000 0
-3-7.	Declared duplicate reaction	1.001120	5.0	23000.0
4348	but 2m2ob=but 2m1d+b2o	9 60E+04	26	61630 0
1010.	Declared duplicate reaction	5.002.01	2.0	01000.0
4349.	but2m2oh=but2m2d+h2o	1.80E+19	-5.0	20000.0
	Declared duplicate reaction			
4350.	but2m2oh=but2m2d+h2o	3.20E+04	2.6	61980.0
	Declared duplicate reaction			
4351	$h_{11} = 2m^2 h_{12} + m^2 h_$	6.31E+16	0.0	81277 0
	Low pressure limit: 0 98207E+75 -0 16121E+02	0 92918E+05		
	TROE centering: 0 40865E+00 0 11043E+04	0 49000E+03	0 285	19E+04
4352	$ch_{3+t} = ch_{8} ch_{8} ch_{2} m_{2} ch$	1 935+14	-0.3	0 0
4353	$h_{11} = 2m^2 ch (+m) = h_{11} = 2m^2 + ch (+m)$	6 33E+20	-1 4	94930 0
4000.	L_{OW} processing limit: 0.60020E+52 -0.10210E+02	0.90200000	1.1	94930.0
	$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$	0.634682+03	0 179	602+10
1251	$\frac{1}{1000} = \frac{1}{1000} = 1$	6 00E112	0.170	52240 0
4334.	but 2m 2 ch + c 2 = but 2m 2 ch - 2 + h c 2	0.00E+13	0.0	10000 0
4333.	but 2m2 = but 2m	2.00E+13	0.0	49800.0
4330.	but 2m 2 on + 0 = but 2m 2 on - 4 + no 2	1.00E+13	0.0	46800.0
4357.	but2m2on+n=but2m2on-1+n2	1.06E+05	2.8	/495.0
4358.	but2m2on+n=but2m2on-3+n2	1.08E+05	2.7	4440.0
4359.	Dut2m2on+n=Dut2m2on-4+n2	3.6/E+U3	3.1	5343.0
1260	but 2m2ab b = but 2m2ab 4 b2	1 620114	0 0	12674 5
4500.	Declared duplicate reaction	1.036/14	0.0	130/4.3
4361	$h_{12} = 2m^2 + h_{12} = h_{12} = h_{12} + h_{12} = h_{$	3 605+06	2 1	9830 0
4362	but 2m2oh+o=but 2m2oh=1+oh	1 96E+06	2.1	4750.0
4363	$h_1 \pm 2m^2 + h_2 = h_1 \pm 2m^2 + h_2 = 3 \pm h_2$	1 44E+05	2.6	3029 0
4364	but 2m 2 ch + c = but 2m 2 ch - 4 + ch	5 100+13	2.0	7850 0
4304.	but 2m2 ch + ch = but 2m2 ch + 1 + b 2c	2 61EL02	2.0	205 4
4303.	but 2m2 ch + ch = but 2m2 ch = 2 + b 2c	0 42E+03	2.9	-203.4
4300.	but 2m2 = b + = b = b = b = 2 = b = 4 + b 2 =	9.436703	2.0	-1409.0
4367.	but 2m 2 = b + c b = but 2m 2 = 4 + h 2 c	8.03E+04	2.5	-301.5
4300.	but 2m 2 = b + b = 2 = but 2m 2 = b + 1 + b 2 = 2	3.24ETUI	3.2	12007 4
4369.	but2m20n+m02=but2m20n-1+m202	1.84E-04	4.8	11061 0
4370.	$but_2m_2on+no2=but_2m_2on-3+n_2o_2$	8.81E-04	4.5	1201.9
4371.	but 2m 2 = b + b = 2 = but 2m 2 = 1 + b = 2	4.44E-04	4.5	12949.1
4372.	$but_2m_2on+no2=but_2m_2o+n_2o_2$	1.70E-01	3.9	1/4/3.1
43/3.	$but_2m_2on+cn_3=but_2m_2on-1+cn_4$	1.08E+03	3.0	10900.0
43/4.	but2m2oh+ch3=but2m2oh-3+ch4	9.20E+02	2.9	8/90.0
43/5.	but2m2on+cn3=but2m2on-4+cn4	3.00E-01	4.0	8200.0
43/6.	but2m2oh+ch3=but2m2o+ch4	1.02E+00	3.6	8221.0
4377.	but2m2oh-l=but2mld+oh	4.15E+21	-2.8	28440.6
43/8.	putzmzon-1=prozon1a+czn5	1.548+22	-2.9	306/5.0
4379.	but2m2oh-1=but2oh1d+ch3	2.95E+22	-3.0	32926.2
4380.	put2m2oh-3=but2oh2d+ch3	3.U/E+23	-3.1	33403.3
4381.	but2m2oh-3=but2m2d+oh	2.93E+23	-3.3	30013.9
4382.	but2m2oh-3=but2m2oh3d+h	4.42E+24	-3.7	41022.0
4383.	but2m2oh-4=c2h4+pro2oh-2	7.75E+22	-3.1	26670.4
4384.	but2m2oh-4=but2m2oh3d+h	2.33E+28	-5.2	41885.5

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
	Declared duplicate reaction				4446.	cyc5h8oh-2=cyc5h8+oh	2.44E+12	0.4	27027.0
4392.	but2m2oh-1=but2m2oh-3	3.86E+44	-10.3	46516.4	4447.	cyc5h8oh-2=pent1oh1d-5	7.31E+10	0.8	33427.0
	Declared duplicate reaction				4448.	cvc5h8oh-2=pent3oh1d-5	2.18E+12	0.4	36670.0
4393.	but2m2oh-4=but2m2oh-3	3.57E+44	-10.3	47092.6	4449.	cyc5h8oh-2=cyptn1oh+h	1.25E+09	1.2	33438.0
	Declared duplicate reaction				4450.	cyc5h8oh-2=cyptn2oh+h	2.47E+10	1.1	36590.0
4394.	but2m2oh-4=but2m2oh-3	4.51E-01	2.2	23372.2	4451.	cvc5h8oh-3=pent1oh4d-1	4.05E+11	0.6	33723.0
	Declared duplicate reaction				4452.	cyc5h8oh-3=pent2oh4d-1	8.94E+11	0.5	36571.0
4395.	but2m2oh-1=but2m2oh-4	7.29E+11	-0.5	20439.2	4453.	cvc5h8oh-3=cvptn2oh+h	1.17E+10	1.1	36797.0
4396.	but2m2oh3d+o=bt2m2oh3d1+oh	1.96E+06	2.4	4750.0	4454.	cvc5h8oh-3=cvptn3oh+h	3.71E+10	1.0	37246.0
4397.	but2m2oh3d+h=bt2m2oh3d1+h2	1.33E+06	2.5	6756.0	4455.	pentlohld-5=c2h4+ch2chchoh	3.30E+13	0.0	22500.0
4398.	but2m2oh3d+oh=bt2m2oh3d1+h2o	4.62E+00	3.7	-2946.0	4456.	pentloh4d-1=c3h5-a+c2h3oh	3.30E+13	0.0	22500.0
4399.	but2m2oh3d+ho2=bt2m2oh3d1+h2o2	2.26E-02	4.5	13850.0	4457.	pent2oh4d-1=c3h5-a+c2h3oh	3.30E+13	0.0	22500.0
4400.	but2m2oh3d+ch3=bt2m2oh3d1+ch4	9.06E-01	3.6	7154.0	4458.	pent2oh4d-1=c5h814+oh	2.44E+12	0.4	27027.0
4401.	isope+oh=>bt2m2oh3d1	5.78E+11	0.0	5705.3	4459.	cvc5h9o+o2=cvc5h8o+ho2	2.14E+10	0.0	1100.0
4402.	isope+oh=>bt.3m2oh3d1	1.09E+12	0.0	3114.0	4460	cyc5h8oh-1+o2=cyc5h8o+ho2	1 54E+18	-1.8	1120.0
4403.	isope+oh=>bt2m1oh3d2	1.74E+06	2.0	-741.0	4461	cyc5h8oh-1+o2=cyptn1oh+ho2	1.78E+04	2.1	470.0
4404.	isope+oh=>bt.3m1oh3d2	1.30E+02	3.0	23600.0	4462	cyc5h8oh-2+o2=cyptn1oh+ho2	4 50E+11	0 0	4000 0
4405.	$but_2oh1d=c_2h5coch3$	9.66E+23	-3.3	59987.5	4463	cyc5h8oh-2+o2=cyptn2oh+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
4406.	but2oh2d=c2h5coch3	9.66E+23	-3.3	49987.5	4464	cyc5h8oh=3+o2=cyptn2oh+ho2	1 58E+12	0.0	5000 0
4407.	cvpent.oh=cvc5h8+h2o	6.40E+04	2.6	62500.0	4465	cyc5h8oh=3+o2=cyptn2oh+ho2	1 58E+12	0.0	5000.0
4408.	cvc5h9+oh=cvpentoh	2.41E+13	0.0	0.0	4466	pent3oh1d=5=c2h4+ch2chchoh	4 24E+10	0.8	29211 0
4409.	cyc5h8oh-1+h=cypent.oh	1.00E+14	0.0	0.0	4467	cvntn2oh=cpd+h2o	1 67E+08	1 2	60311 0
4410.	cyc5h8oh-2+h=cypentoh	1.00E+14	0.0	0.0	4468	cyc5h7+oh=cyptn2oh	1 00E+13	0.0	0.0
4411.	cvc5h8oh-3+h=cvpentoh	1.00E+14	0.0	0.0	4469	cyptnloh+b=cyptnloh-1+b2	5 40E+04	2 5	-1900 0
4412.	cvpentoh+o2=cvc5h8oh-1+ho2	1.00E+13	0.0	46800.0	4470	cvptnloh+o=cvptnloh-1+ob	8 80E+10	0.7	3250.0
4413.	cvpentoh+o2=cvc5h8oh-2+ho2	2.00E+13	0.0	49800.0	4471	cymtnloh+oh=cymtnloh-1+h2o	3 00E+06	2 0	-1520.0
4414	cvpentoh+o2=cvc5h8oh-3+ho2	2.00E+13	0.0	49800.0	4472	cyptn1oh+bo2=cyptn1oh-1+b2o2	6 40E+03	2.0	12400 0
4415	cypentoh+h=cyc5h9o+h2	9.46E+02	3.1	8701.0	4473	cyptnloh+ch3=cyptnloh-1+ch4	1 00E+11	0.0	7300.0
4416	cvpentoh+h=cvc5h8oh-1+h2	2.40E+07	1.9	2460.0	4473.	cypthion+chio-cypthion i+chi4	5 408+04	2.5	-1900.0
4417.	cypentoh+h=cyc5h8oh-2+h2	2.16E+05	2.7	4440.0	4474.	cyptn1oh+o=cyptn1oh-2+ob	8 80F+10	2.5	3250 0
4418	cypentoh+h=cyc5h8oh=3+h2	9 52E+04	2 6	3130 1	4476	cypthion-cypthion 2:01	3 005+06	2 0	-1520.0
4419	cypentoh+o=cyc5h9o+oh	1.46E-03	4.7	1727.0	4477	cyptn10h+bn2=cyptn10h+2+h2o2	6 40E+03	2.0	12400 0
4420.	cvpentoh+o=cvc5h8oh-1+oh	1.45E+05	2.4	876.0	4478	cyptn1oh+nb2=cyptn1oh-2+cb4	1 00E+11	0.0	7300.0
4421.	cvpentoh+o=cvc5h8oh-2+oh	2.90E+05	2.4	876.0	4479	cyptn2oh+b=cyptn1oh-2+b2	2 50E+04	2.5	-2790.0
4422.	cvpentoh+o=cvc5h8oh-3+oh	9.54E+04	2.7	2106.0	4480	cyptn2oh+n=cyptn1oh-2+oh	3 40E+10	0.7	1330 0
4423.	cypentoh+oh=cyc5h9o+h2o	2.77E+06	1.6	-32.5	4481	cyptn2oh+oh=cyptn1oh-2+h2o	1 30E+06	2 0	-2620.0
4424	cvpentoh+oh=cvc5h8oh-1+h2o	3.20E+05	2.2	-1573.5	4482	cypth20h+bo2=cypth10h-2+h2o2	1 608+04	2.0	10000 0
4425.	cypentoh+oh=cyc5h8oh-2+h2o	6.70E+03	2.8	-2108.7	4402.	cyptn2oh+ch3=cyptn1oh-2+ch4	5 00E+10	2.0	5600.0
4426	cvpentoh+oh=cvc5h8oh-3+h2o	9.14E+04	2.6	-940.0	4403.	cypth20h+b=cypth10h 2+ch4	5 408+04	2.5	-1900.0
4427	cvpentoh+ho2=cvc5h9o+h2o2	1 70E-01	3 9	17473 1	4404.	cypthzon n=cypthzon 1 lob	9 90E 104	2.5	2250.0
4428	cypentoh+ho2=cyc5h8oh-1+h2o2	2.31E-01	3.7	7719.7	4403.	cyptn2on+o-cyptn2on-1+on	3 00E+10	2.0	-1520.0
4429	cvpentoh+ho2=cvc5h8oh-2+h2o2	1 76E-03	4 5	11261 9	4400.	armtn2ah/ha2=armtn2ah_1/h2a2	6 40E+03	2.0	12400 0
4430	cypent.oh+ho2=cyc5h8oh-3+h2o2	3.88E+04	2.5	14170.0	440/.	$c_{ypch20h+h02} = c_{ypch20h-1+h02}$	0.40ETUS 1 00E+11	2.0	7300.0
4431	cypentoh+ch3=cyc5h9o+ch4	2.04E+00	3.6	7722.0	4400.	cyptnzon + Ch3 - Cyptnzon - 1 + Ch4	1 092:05	2.5	-1900.0
4432	cypentoh+ch3=cyc5h8oh-1+ch4	6.60E+02	29	5730 0	4409.	$c_{ypenson} = c_{ypenson} = c_{ypenson} = c_{ypenson}$	1 76ETUJ	2.5	-1900.0
4433	cypentoh+ch3=cyc5h8oh-2+ch4	1.84E+03	2.9	8790 0	4490.	cypuison+o=cypuizon-i+on	1./0E+11	0.7	323U.U
4434	cypentoh+ch3=cyc5h8oh-3+ch4	2.03E+00	2.2	6913 4	4491.	cyptiloon+on=cyptiloon+1+h2o	0.UUE+U6	2.0	-1320.0
4435	cyc5h9o=cyc5h8oh-1	3.07E+07	1.6	22412.0	4492.	cypthson+noz=cypthzon-1+nzoz	1.28E+U4	2.0	12400.0
4436	cyc5h9o=cyc5h8oh-2	3.85±+04	23	18495 0	4493.	cypthson+ch3=cypth2on-1+ch4	2.UUE+11 1 E0E+10	0.0	1500.0
4437	cyc5h9o=cyc5h8oh=3	2 29E+06	1.6	16762 0	4494.	cypenion-i+oz=conoon3+noz	1.58E+12	0.0	15200.0
4438	cyc5h8oh-1=cyc5h8oh-2	6 2411+04	2 5	10,02.0 39357 N	4495.	cypunion-2+o2=conoon3+ho2	1.588+12	0.0	15200.0
	CYCONOON T-CYCONOON Z	0.245104	2.J	5,55,0	4496.	cypunion-2+o2=conoon2+ho2	1.58E+12	υ.υ	15200.0

4497.	cyptn2oh-1+o2=c5h5oh2+ho2	7.90E+11	0.0	14200.0	
4498.	cyptn2oh-1+o2=c5h5oh1+ho2	1.58E+12	0.0	15200.0	
4499.	cyptnloh=c5h5oh3+h2	1.12E+13	0.0	60010.0	
4500.	cyptnloh=c5h5oh2+h2	1.12E+13	0.0	60010.0	
4501.	cyptn2oh=c5h5oh2+h2	1.12E+13	0.0	60010.0	
4502.	cyptn2oh=c5h5oh1+h2	1.12E+13	0.0	60010.0	
4503.	cyptn3oh=c5h5oh1+h2	2.24E+13	0.0	55010.0	
4504.	cyptnloh-1=c5h5oh3+h	7.50E+08	0.0	23000.0	
4505.	cyptnloh-2=c5h5oh3+h	7.50E+08	0.0	23000.0	
4506.	cyptnloh-2=c5h5oh2+h	7.50E+08	0.0	23000.0	
4507.	cyptn2oh-1=c5h5oh2+h	3.25E+08	0.0	21000.0	
4508.	cyptn2oh-1=c5h5oh1+h	7.50E+08	0.0	23000.0	
4509.	cpd+oh=>cyptn2oh-1	4.60E+12	0.0	70.0	
4510.	cvptn2oh-1=>cpd+oh	9.62E+13	0.0	40670.0	
4511.	cvc5h8o<=>acvc5h7o+h	1.23E+14	0.4	91069.0	
4512.	cyc5h8o<=>bcyc5h7o+h	1.00E+16	0.0	94990.0	
4513.	cyc5h8o=c2h4+c2h4+co	1.51E+27	-3.5	85301.0	
	Declared duplicate reaction				
4514.	cvc5h8o=c2h4+c2h4+co	1.62E+23	-2.0	85707.0	
	Declared duplicate reaction				
4515.	cvc5h8o=cvptn1oh	7.77E+16	-1.0	76004.0	
4516.	cvc5h8o+h=acvc5h7o+h2	5.28E+06	2.2	4326.0	
	Declared duplicate reaction				
4517.	cvc5h8o+h=acvc5h7o+h2	6.78E+06	2.1	2581.3	
	Declared duplicate reaction				
4518.	cvc5h8o+oh=acvc5h7o+h2o	2.34E+03	3.0	-1623.4	
4519.	cyc5h8o+ho2=acyc5h7o+h2o2	9.91E-04	4.7	10014.5	
4520.	cyc5h8o+ch3=acyc5h7o+ch4	1.10E+02	3.3	6022.9	
	Declared duplicate reaction				
4521.	cvc5h8o+ch3=acvc5h7o+ch4	6.76E+01	3.2	4469.4	
	Declared duplicate reaction				
4522.	cvc5h8o+o=acvc5h7o+oh	4.18E+05	2.5	3776.3	
	Declared duplicate reaction				
4523.	cvc5h8o+o=acvc5h7o+oh	2.66E+05	2.4	2055.4	
	Declared duplicate reaction				
4524.	cvc5h8o+h=bcvc5h7o+h2	4.10E+06	2.3	5879.5	
	Declared duplicate reaction				
4525.	cvc5h8o+h=bcvc5h7o+h2	3.42E+06	2.3	4421.6	
	Declared duplicate reaction				
4526.	cvc5h8o+oh=bcvc5h7o+h2o	1.33E+05	2.6	-1243.9	
4527.	cvc5h8o+ho2=bcvc5h7o+h2o2	5.45E-02	4.3	11836.6	
4528.	cvc5h8o+ch3=bcvc5h7o+ch4	1.70E+01	3.5	7935.0	
	Declared duplicate reaction				
4529.	cvc5h8o+ch3=bcvc5h7o+ch4	1.94E+01	3.5	6859.5	
	Declared duplicate reaction				
4530	cvc5h8o+o=bcvc5h7o+oh	1 03E+05	26	2605 2	
	Declared duplicate reaction	1.002.00	2.0	2000.2	
4531	cvc5h8o+o=bcvc5h7o+oh	1 41E+05	2 5	1577 4	
	Declared duplicate reaction				
4532	cvc5h8o+o2=acvc5h7o+ho2	8 04E+13	0.0	45850 0	
4533	cyc5h8o+o2=bcyc5h7o+ho2	7 94E+13	0.0	47690 0	
4534	cyc5h8o+ch3o<=>acyc5h7o+ch3oh	1 15E+12	0.0	4573 0	
4535	cyc5h8o+ch3o<=>bcyc5h7o+ch3oh	2 90E+11	0.0	4570 0	
4536	cyc5h8o+ch3o2 <=>acyc5h7o+ch3o2b	6 88E+12	0 1	17880 0	
4537	cyc5h8o+ch3o2 <=>bcyc5h7o+ch3o2h	4 07E+01	3.6	14810 0	
4538	$cyc5h8o+c2h3 \le acyc5h7o+c2h4$	6 00E+11	0.0	5600.0	
4539	$cyc5h8o+c2h3 \le bcyc5h7o+c2h4$	8 00E+11	0.0	16800.0	
4540	cvc5h8o+c2h5 <=>acvc5h7o+c2h6	6.00E+11	0.0	8600.0	

4541.	cyc5h8o+c2h5<=>bcyc5h7o+c2h6	1.00E+11	0.0	10400.0
4542.	acyc5h7o=petcoc2h3	1.32E+14	0.0	40511.5
4543.	acyc5h7o=ch2ch2ch2chco	9.50E+13	0.0	36687.4
4544.	acyc5h7o=acyc5h6o+h	3.00E+13	0.0	38000.0
4545.	bcyc5h7o=ch2coch2c2h3	1.39E+13	0.0	33006.7
4546.	bcyc5h7o=c4h7co	8.60E+12	0.0	29110.9
4547.	bcyc5h7o=acyc5h6o+h	3.00E+13	0.0	35000.0
4548.	bcyc5h7o=bcyc5h6o+h	3.00E+13	0.0	38000.0
4549.	acyc5h7o=>bcyc5h7o	3.15E+42	-9.9	45227.8
4550.	bcyc5h7o=>acyc5h7o	6.63E+52	-13.1	44578.0
4551.	petcoc2h3=c2h4+c2h3co	1.68E+14	0.0	25262.9
4552.	ch2ch2ch2chco=c2h4+c2h3co	5.69E+13	0.0	25000.0
4553.	ch2coch2c2h3=>ch2co+c3h5-a	3.92E+13	0.0	30377.6
4554.	c4h7co=>co+c4h714	6.08E+14	0.0	15559.3
4555.	c4h7co=>ch2co+c3h5-a	5.50E+11	0.0	16419.7
4556.	acvc5h7o+o2=ho2+acvc5h6o	1.58E+12	0.0	5000.0
4557.	bcvc5h7o+o2=ho2+acvc5h6o	1.58E+12	0.0	2500.0
4558.	bcyc5h7o+o2=ho2+bcyc5h6o	1.58E+12	0.0	5000.0
4559.	acvc5h6o+oh=a-acvc5h5o+h2o	1.85E+02	3.2	-1944.1
4560.	acyc5h6o+h<=>a-acyc5h5o+h2	2.64E+06	2.2	4326.0
	Declared duplicate reaction			
4561.	acyc5h6o+h<=>a-acyc5h5o+h2	3.39E+06	2.1	2581.3
	Declared duplicate reaction			
4562.	acyc5h6o+o<=>a-acyc5h5o+oh	2.09E+05	2.5	3776.3
	Declared duplicate reaction			
4563.	acyc5h6o+o<=>a-acyc5h5o+oh	1.33E+05	2.4	2055.4
	Declared duplicate reaction			
4564.	acyc5h6o+ho2<=>a-acyc5h5o+h2o2	4.95E-04	4.7	10014.5
4565.	acyc5h6o+ch3<=>a-acyc5h5o+ch4	5.49E+01	3.3	6022.9
	Declared duplicate reaction			
4566.	acyc5h6o+ch3<=>a-acyc5h5o+ch4	3.38E+01	3.2	4469.4
	Declared duplicate reaction			
4567.	acyc5h6o+oh<=>b-acyc5h5o+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
4568.	acyc5h6o+h<=>b-acyc5h5o+h2	5.40E+04	2.5	-1900.0
4569.	acyc5h6o+o<=>b-acyc5h5o+oh	8.80E+10	0.7	3250.0
4570.	acyc5h6o+ho2<=>b-acyc5h5o+h2o2	6.40E+03	2.6	12400.0
4571.	acyc5h6o+ch3<=>b-acyc5h5o+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4572.	bcyc5h6o+oh<=>b-acyc5h5o+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
4573.	bcyc5h6o+h<=>b-acyc5h5o+h2	1.08E+05	2.5	-1900.0
4574.	bcyc5h6o+o<=>b-acyc5h5o+oh	1.76E+11	0.7	3250.0
4575.	bcyc5h6o+ho2<=>b-acyc5h5o+h2o2	1.28E+04	2.6	12400.0
4576.	bcyc5h6o+ch3<=>b-acyc5h5o+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
4577.	b-acyc5h5o=co+nc4h5	1.62E+56	-11.9	72570.0
4578.	a-acyc5h5o=c2h2+c2h3co	3.61E+12	0.4	42183.0
4579.	b-acyc5h5o+o2=c2h3cho+co+hco	1.70E+09	1.0	26400.0
4580.	b-acyc5h5o+ho2=>c2h3chcho+co+oh	4.50E+12	0.0	0.0
4581.	c5h4o+h=b-acyc5h5o	1.68E+49	-10.8	17950.0
4582.	b-acyc5h5o+o2=c5h4o+ho2	1.58E+12	0.0	15000.0

Annexe 5.1

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

• Résultats expérimentaux des délais mesurées et simulés

P ₀ (bar)	T ₀ (K)	Pc (bar)	Tc (K)	1000/Tc	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

φ=0.5 diluent (80% Ar/20%N₂; 30%Ar/70%N₂)

• φ=1 diluent (20%Ar/80%N₂)

T ₀ (K)	P ₀ (bar)	Pc (bar)	Tc (K)	1000/Tc	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_2H_4
Ethane	—	C_2H_6
Propene		C_3H_6
Propane		C ₃ H ₈
Acetaldehyde	Ň	C_2H_4O
Butene		C_4H_8
Acetone	\sim	C ₃ H ₆ O
allene		C_3H_4
trans-2-butene		C_4H_8
1-butene		C_4H_8
isobutene		C_4H_8
cis-2-butene		C_4H_8
propyne		C ₃ H ₄
1,3-butadiene		C4H6
trans-2-pentene		C ₅ H ₁₀
cyclopentene		C_5H_8
1-pentene		$C_{5}H_{10}$
cis-2-pentene		C ₅ H ₁₀
xylene		$C_{8}H_{10}$
2-butyne		C_4H_6
isoprene		C_5H_8
methyl-cyclopentene		$C_{6}H_{10}$
2-methyl-2-pentene		C ₆ H ₁₂
1,4-pentadiene		C_5H_8
trans-2,4-hexadiene		C ₆ H ₁₀

cis-2,4-hexadiene	$C_{6}H_{10}$
1-methyl-1,3- cyclopentadiene	C_6H_8
methyl-pentadiene	$C_{6}H_{10}$
2-methyl-furan	C ₅ H ₆ O
benzene	C_6H_6
toluene	C7H8

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 aérospatial 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 utilisées 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