



**HAL**  
open science

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

Helena Ramirez Lancheros

► **To cite this version:**

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

**HAL Id: tel-00717701**

**<https://theses.hal.science/tel-00717701>**

Submitted on 29 Aug 2014

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

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



# Thèse

Présentée à

**L'UNIVERSITE D'ORLEANS**

Pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE D'ORLEANS**

Discipline : Cinétique chimique appliquée à la combustion

par

**HELENA P. RAMIREZ L.**

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

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

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



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





## *Avant-propos*

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

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

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

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

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

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

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

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



# Sommaire

<b>Introduction</b> .....	<b>1</b>
<b>Chapitre 1.</b> ....	<b>5</b>
<b>Les biocarburants</b> .....	<b>5</b>
1.1 Contexte actuel.....	5
<b>1.2.1 Filière bioéthanol</b> .....	<b>6</b>
<b>1.2.2 Filière bio-Diesel (EMHV - ester méthylique d'huile végétale)</b> .....	<b>8</b>
1.3 Le cadre législatif européen .....	10
<b>1.3.1 Réduction des émissions CO<sub>2</sub> des véhicules légers</b> .....	<b>10</b>
<b>1.3.2 Les normes antipollution</b> .....	<b>12</b>
<b>1.3.3 L'incorporation des biocarburants dans les carburants fossiles</b> .....	<b>12</b>
1.4 L'offre et la demande.....	14
1.5 L'avenir des biocarburants.....	17
<b>1.5.1 Les biocarburants de 1<sup>ère</sup> génération</b> .....	<b>17</b>
<b>1.5.2 Les biocarburants de 2<sup>ème</sup> génération</b> .....	<b>19</b>
<b>1.5.3 Les biocarburants de 3<sup>ème</sup> génération</b> .....	<b>20</b>
<b>Perspectives</b> .....	<b>23</b>
<b>Chapitre 2.</b> ....	<b>25</b>
<b>Combustion du Gazole contenant du Bio-Diesel</b> .....	<b>25</b>
2.1 Généralités physico-chimiques des réactifs de départ.....	26
<b>2.1.1 Composition chimique du gazole</b> .....	<b>26</b>
<b>2.1.2 Composition chimique du bio-Diesel</b> .....	<b>28</b>
2.2 Composition chimique d'un gazole contenant du bio-Diesel .....	32
<b>2.2.1 Composition d'un mélange par famille chimique</b> .....	<b>32</b>
<b>2.2.2 Composition d'un mélange en fonction du nombre d'atomes de carbone</b> .....	<b>33</b>
2.3 Effet de la structure moléculaire des esters d'acides gras sur la combustion du gazole.....	33
2.4 Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures.....	36
<b>2.4.1 Mécanisme d'oxydation à basses températures</b> .....	<b>36</b>
<b>2.4.2 Mécanisme d'oxydation à hautes températures</b> .....	<b>39</b>
2.5 Composés purs utilisés comme carburant modèle .....	41
<b>2.5.1 Oxydation du <i>n</i>-décane</b> .....	<b>44</b>

2.5.2 Oxydation du 1-méthylnaphtalène .....	46
2.5.3 Oxydation des esters méthyliques.....	48
2.5.4 Oxydation des mélanges <i>n</i> -décane/ 1-méthylnaphtalène .....	50
<i>Applications de la Cinétique Chimique Détaillée</i> .....	53
<i>Conclusion</i> .....	56
<b>Chapitre 3</b> .....	57
<i>Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de gazole, bio-Diesel B30 et de carburants modèles en réacteur auto-agité.</i> .....	57
3.1 Description du réacteur auto-agité JSR.....	57
3.1.1 Principe de fonctionnement.....	58
3.1.2. Techniques d'analyse des gaz.....	60
3.2 Méthodologie .....	61
3.3 Résultats expérimentaux .....	63
3.3.1 Oxydation du gazole commercial.....	64
a) Conditions expérimentales.....	64
b) Résultats expérimentaux .....	65
3.3.2 Oxydation du B30 réel .....	69
a) Conditions expérimentales.....	69
b) Résultats expérimentaux .....	70
3.3.3 Oxydation du carburant modèle de type gazole (70% <i>n</i> -décane+30% 1-méthylnaphtalène).....	75
a) Conditions expérimentales.....	75
b) Résultats expérimentaux .....	76
3.3.4 Oxydation du carburant modèle de type B30 (49% <i>n</i> -décane / 21% 1-méthylnaphtalène / 30% octanoate de méthyle) .....	83
a) Conditions expérimentales.....	83
b) Résultats expérimentaux .....	84
3.3.5 Comparaison des cinétiques d'oxydation du carburant réel et du carburant modèle.....	91
a) Oxydation du gazole réel par rapport au carburant modèle de type gazole .....	91
b) Oxydation du B30 réel par rapport au carburant modèle de type B30 .....	93
3.3.6 Influence de la richesse sur la réactivité de carburant. ....	95
3.3.7 Influence de la pression sur l'oxydation des carburants.....	96
3.4 Développement et validation du modèle cinétique d'oxydation du gazole .....	98
3.4.1 Base C <sub>0</sub> -C <sub>4</sub> .....	98
3.4.2 Le sous-mécanisme d'oxydation du <i>n</i> -décane .....	98
3.4.3 Le sous-mécanisme d'oxydation du 1-méthylnaphtalène .....	100

<b>3.4.4 Construction du mécanisme d'oxydation du carburant modèle de type gazole (70%<i>n</i>-décane+30% 1-méthyl<i>n</i>aphtalène) .....</b>	<b>101</b>
<b>3.4.5 Influence des modifications apportées : réactions d'interaction.....</b>	<b>102</b>
<b>3.4.6 Simulations en réacteur auto-agité .....</b>	<b>105</b>
<i>a) Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité .....</i>	<i>105</i>
3.5 Développement et validation du modèle cinétique d'oxydation du carburant de type B30.....	113
<b>3.5.1 Le sous-mécanisme d'oxydation de l'octanoate de méthyle .....</b>	<b>113</b>
<b>3.5.2 Construction du mécanisme d'oxydation du carburant modèle de type bio-Diesel( 49%<i>n</i>-décane /21% 1-méthyl<i>n</i>aphtalène/30% octanoate de méthyle).....</b>	<b>114</b>
<i>a) Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité .....</i>	<i>114</i>
<i>b) Analyse de sensibilité.....</i>	<i>120</i>
<i>c) Analyse de voies réactionnelles .....</i>	<i>121</i>
<b>Conclusion .....</b>	<b>124</b>
<b>Chapitre 4 .....</b>	<b>125</b>
<b><i>Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de carburants modèles en tube à choc .....</i></b>	<b><i>125</i></b>
4.1 Le tube à choc .....	125
<b>4.1.1 Principe de fonctionnement d'un tube à choc .....</b>	<b>125</b>
<b>4.1.2 Théorie de l'onde de choc- Physique de l'onde de choc.....</b>	<b>127</b>
<i>a) Calcul des paramètres derrière l'onde de choc incidente :.....</i>	<i>128</i>
<i>b) Calcul des paramètres derrière l'onde de choc réfléchi.....</i>	<i>129</i>
<b>4.1.3 Description du tube à choc avec système de chauffage du laboratoire IVG.....</b>	<b>130</b>
4.2 Méthodologie .....	131
<b>4.2.1 Incertitudes liées aux expériences en tube à choc.....</b>	<b>131</b>
<b>4.2.2 Préparation du mélange et injection dans la section à basse pression .....</b>	<b>132</b>
<b>4.2.3 Calculs du délai d'auto-inflammation.....</b>	<b>132</b>
4.3 Résultats expérimentaux .....	133
<b>4.3.1 Etude des délais d'auto-inflammation du carburant modèle type B30 dans l'air.....</b>	<b>133</b>
<i>a) Conditions expérimentales.....</i>	<i>133</i>
<i>b) Résultats expérimentaux .....</i>	<i>134</i>
<i>c) Influence de la richesse .....</i>	<i>136</i>
<i>d) Influence de la pression.....</i>	<i>136</i>
4.4 Modélisation .....	138
<b>4.4.1 Influence des modifications apportées.....</b>	<b>138</b>
<i>c) Réévaluation des constantes de vitesse.....</i>	<i>138</i>
<i>d) Ajout de nouvelles réactions.....</i>	<i>139</i>
<i>b) Effet des changements apportés sur les prédictions en JSR .....</i>	<i>143</i>

4.4.2 Confrontation modèle-expérience en tube à choc .....	144
<b>Conclusion</b> .....	<b>156</b>
<b>Chapitre 5</b> .....	<b>157</b>
<b>Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de carburants modèles en flammes laminaires pré-mélangées</b> .....	<b>157</b>
5.1 Régimes de propagation de flamme .....	157
5.2 Structure d'une flamme de pré-mélange .....	157
<b>5.2.1 Théorie thermique : Loi de Mallard et Le Châtelier</b> .....	<b>158</b>
<b>5.2.2 Modèle de diffusion Thermique et massique : Zeldovich, Frank-Kamenetskii et Semenov</b> .....	<b>159</b>
5.3 Vitesse fondamentale de flamme .....	159
5.4 Vitesse fondamentale de flamme à étirement nul .....	161
5.5 Influence des conditions initiales sur la propagation des flammes .....	162
<b>5.5.1 Pression initiale</b> .....	<b>162</b>
<b>5.5.2 Température initiale</b> .....	<b>163</b>
<b>5.5.3 Influence du rapport d'équivalence</b> .....	<b>163</b>
<b>5.5.4 Influence de la dilution</b> .....	<b>164</b>
<b>5.5.5 Influence de la nature du combustible</b> .....	<b>164</b>
5.6 La Bombe Sphérique SF2 .....	165
<b>5.6.1 Principe de fonctionnement</b> .....	<b>166</b>
5.7 Méthodologie .....	167
5.8 Résultats expérimentaux .....	170
<b>5.8.1 Conditions expérimentales</b> .....	<b>170</b>
<b>5.8.5 Carburant type IDEA-fuel : 70%mol n-décane-30%mol 1-méthyl-naphtalène</b> .....	<b>171</b>
a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar .....	171
b) Résultats obtenus à une pression initiale de 4 bar .....	175
<b>5.8.6 Carburant modèle type B30: 49%mol n-décane-30%mol octanoate de méthyle-21%mol 1-méthyl-naphtalène</b> .....	<b>177</b>
a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar .....	177
b) Résultats obtenues à une pression initiale de 4 bar .....	180
5.9 Analyses de résultats .....	183
<b>5.9.1 Effet de la pression initiale sur la vitesse de flamme des carburants modèles</b> .....	<b>183</b>
a) Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle gazole .....	183
a) Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle B30 .....	184
5.10 Modélisation .....	185
<b>5.10.1 Réduction et validation du modèle cinétique d'oxydation</b> .....	<b>185</b>
a) Régime à basse température .....	185
b) Régime à haute température-Méthode PFA (path flux analysis) .....	185
<b>5.10.2 Confrontation modèle-expérience en bombe sphérique SF2</b> .....	<b>188</b>

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



## Liste de Figures

Figure 1. Schéma thermique et biologique pour la production de bioéthanol. <i>The Royal Society 2008</i> .....	7
Figure 2. Relation entre le taux de bioéthanol et la pression de vapeur pour des mélanges essence/bioéthanol ( <i>Source : basé sur les données fournies par J. Bennett, Ford Motor Company 2007</i> ).....	8
Figure 3. Transestérification d'un triglycéride par le méthanol (CH <sub>3</sub> OH).....	9
Figure 4. Procédé de fabrication d'EMHV. ( <i>Source : DGEMP</i> ).....	9
Figure 5. Evolution du parc automobile mondial. Une croissance tirée par les pays en voie de développement. ( <i>Source : TOTAL, Mosconi 2006</i> ).....	11
Figure 6. Evolution des émissions mondiales de CO <sub>2</sub> et prévisions à l'horizon 2030. Mosconi 2006.....	11
Figure 7. Taux d'incorporation de biocarburants. Cadre législatif : cas de la France (Bénézit 2007).....	13
Figure 8. Consommation mondiale d'énergie dans le transport routier en 2006. ( <i>Source : IFP</i> ).....	14
Figure 9. Production mondiale de biocarburant (en Mt). ( <i>Source : F.O. Licht, Christoph Berg, présentation au World Biofuels 2006, Seville</i> ).....	15
Figure 10. (a) Consommation de biocarburants destinés au transport dans l'Union européenne en 2010, (b) Comparaison de l'évolution de la consommation européenne de biocarburant (en tep) entre 2003 et 2010 avec les objectifs de la directive sur les biocarburants (2003/30/EC – <i>Source EurObserv'ER 2010</i> ).....	16
Figure 11. Evolution du prix en dollars (a) par baril de pétrole et (b) par tonne de maïs jaune ( <i>source : Conseil Monétaire Centre-américain</i> ) et (c) par tonne de huile de palme ( <i>source : index mundi</i> ).....	18
Figure 12. Biocarburants de deuxième génération. ( <i>Source : TOTAL /ENERZINE</i> ).....	19
Figure 13. Vue microscopique de micro algues ( <i>source www.devicedaily.com</i> ).....	21
Figure 14. Algues cultivés dans des eaux usées ( <i>source : News Center Department of Energy</i> ).....	22
Figure 15. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un gazole commercial ( <i>source Total</i> ).....	27
Figure 16. Glycerol tri-2-éthylhexanoate.....	28
Figure 17. Composition des bio-Diesels en fonction de sa matière première ( <i>source DOE/GO-102006-2358 Third Edition September 2006</i> ).....	29
Figure 18. Exemple de l'apparence optique d'un gazole fossile et ses mélanges avec du bio-Diesel (JME : Jatropha Methyl Ester). Schönborn 2009.....	30
Figure 19. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un B10 commercial ( <i>source SGS</i> ).....	33
Figure 20. Analyse détaillée des hydrocarbures composant un carburant B10. Distribution par famille chimique ( <i>source SGS/RENAULT</i> ).....	33
Figure 21. Emission des particules (a) en fonction du nombre d'insaturation sur la chaîne carbonée et (b) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique d'huile de colza (RME).....	34
Figure 22. Emission de NO <sub>x</sub> (a) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique d'huile de colza (RME) et (b) en fonction de la température de flamme adiabatique de différents esters d'acides gras. Schönborn 2009.....	35
Figure 23. Voies de réaction à base température (Griffiths <i>et al.</i> 1995).....	37
Figure 24. (a)Variation de la concentration du carburant en fonction de la température mettant en évidence l'évolution des mécanismes d'oxydation avec la température. (b) Fraction brûlée du carburant et dégagement d'énergie en fonction du degré vilebrequin (Alséda 2007).....	39
Figure 25. Voies de réaction à hautes températures (Griffiths <i>et al.</i> 1995).....	39
Figure 26. Molécule de <i>n</i> -décane.....	44
Figure 27. Molécule d' 1-méthylnaphtalène.....	46
Figure 28. Schéma représentatif d'une molécule d'octanoate de méthyle.....	48
Figure 29. Comparaison des pressions obtenues pour un gazole et un IDEA-fuel. Barths <i>et al.</i> 1999.....	51

Figure 30. Concentration dans les gaz d'échappement de a) NO <sub>x</sub> et b) Suie pour différents carburants. Barths <i>et al.</i> 1999. ....	51
Figure 31. Consolidation d'un mécanisme détaillé pour la combustion des carburants de type gazole. ....	54
Figure 32. Réacteur auto-agité par jets gazeux (ou Jet Stirred Reactor, JSR). ....	58
Figure 33. Feuille de calcul Excel des débits d'azote, d'oxygène et de carburant, pour un mélange stoechiométrique de carburant modèle type gazole à 10 bar. ....	62
Figure 34. Evolution de la formation des espèces en fonction de la température lors de l'oxydation du carburant modèle de type gazole (70% de <i>n</i> -décane+30% 1-méthylnaphtalène).....	63
Figure 35. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	66
Figure 36. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	67
Figure 37. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	68
Figure 38. Oxydation du gazole réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,065%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	69
Figure 39. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	71
Figure 40. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	72
Figure 41. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,06% .....	73
Figure 42. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,06%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	74
Figure 43. Composition du carburant modèle type gazole ou IDEA-fuel : 70% <sub>mol</sub> de <i>n</i> -décane et 30% <sub>mol</sub> de 1-méthylnaphtalène.....	75
Figure 44. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	77
Figure 45. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	78
Figure 46. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	79
Figure 47. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1% ...	80
Figure 48. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=6 bar ; φ=0,5 ; τ=0,6s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	81
Figure 49. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR : P=6 bar ; φ=1,0 ; τ=0,6s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	82
Figure 50. Composition du carburant modèle type B30 : 49% <sub>mol</sub> de <i>n</i> -décane, 21% <sub>mol</sub> de 1-méthylnaphtalène et 30% <sub>mol</sub> d'octanoate de méthyle.....	83
Figure 51. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=0,25 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	85
Figure 52. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=0,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	86
Figure 53. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=1,0 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	87
Figure 54. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=10 bar ; φ=1,5 ; τ=1s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	88
Figure 55. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=6 bar ; φ=0,5 ; τ=0,6s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	89
Figure 56. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR : P=6 bar ; φ=1,0 ; τ=0,6s ; X <sub>H<sub>C</sub></sub> = 0,1%. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%.....	90
Figure 57. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) : φ=0,25, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. ....	92
Figure 58. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) : φ=1, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%...	93
Figure 59. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) : φ=0,25, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. ....	94
Figure 60. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) : φ=1, 10 bar et τ=1s. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de ± 10%. ....	95

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

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

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

## Liste de Tableaux

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



## ***Introduction***

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

L'épuisement progressif des ressources en combustibles fossiles et les problèmes de pollution ont attiré l'attention des chercheurs vers la recherche de carburants alternatifs. En principe, avec un carburant alternatif, la disponibilité des ressources, ainsi que la réduction des émissions de polluants (CO, CO<sub>2</sub>, NOx, suies, HC...) permettront la prolongation des réserves pétrolières d'une part, et la préservation de l'environnement d'autre part.

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

Face à ces problématiques, des chercheurs pensent que les biocarburants de deuxième génération, fabriqués à partir de déchets végétaux, ou à partir de cultures spécialement destinées à cet effet, sur des terrains non propices à la production alimentaire, offrent un grand espoir pour la production des biocarburants dans un futur proche. Ainsi, par exemple, les biocarburants à partir d'algues offrent de nombreux avantages malgré la jeunesse de sa technologie (Oilgae Report 2011) : les algues ont une rapide croissance, elles peuvent être cultivées dans des réservoirs d'eau salée et d'eau d'égout (en le nettoyant en même temps), elles peuvent être utilisées comme un moyen de capter le CO<sub>2</sub>, etc.

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



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

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

La structure chimique du bio-Diesel diffère sensiblement de celle du gazole en raison de la présence d'atomes d'oxygène dans la chaîne alkyle. Ainsi, plusieurs études ont signalé que la combustion d'un carburant bio-Diesel entraîne une baisse des émissions de particules, d'hydrocarbures imbrûlés et de CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> ainsi qu'une légère augmentation des émissions d'oxydes d'azote (NO<sub>x</sub>) et de formaldéhyde (CH<sub>2</sub>O) par rapport au gazole conventionnel. De la même façon, cette étude a montré que l'oxygène intermoléculaire présent dans le carburant type bio-Diesel induit une vitesse d'oxydation plus importante que pour le carburant type gazole. Par rapport au gazole, les études sur la chimie détaillée de la combustion des mélanges gazole/biodiesel sont moins nombreuses. Cela vient des difficultés à maintenir en phase gazeuse ces mélanges principalement composés de longues chaînes carbonées (de l'ordre de 16 à 20 atomes de carbone par chaîne).

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

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

---

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

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

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



# ***Chapitre 1.***

## ***Les biocarburants***

### 1.1 Contexte actuel

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

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

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

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

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

---

<sup>2</sup> <http://www.biofuels-platform.ch/infos/eu-biodiesel.php>

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

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

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

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

## 1.2 Les principales filières d'aujourd'hui

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

### 1.2.1 Filière bioéthanol

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

---

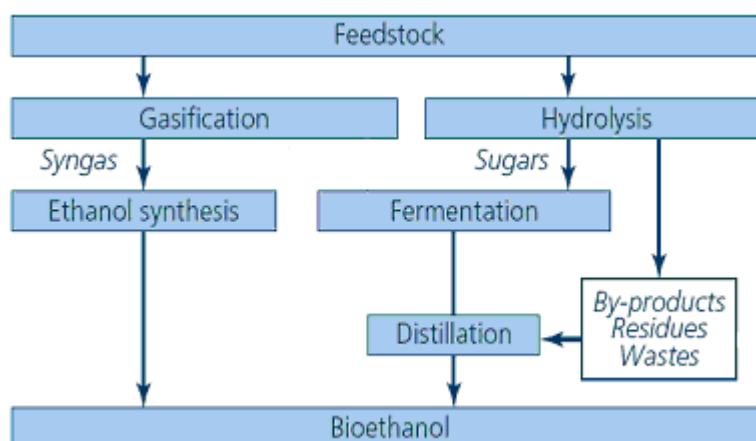
[http://legislacao.planalto.gov.br/legisla/legislacao.nsf/Viw\\_Identificacao/lei%208.723-1993?OpenDocument](http://legislacao.planalto.gov.br/legisla/legislacao.nsf/Viw_Identificacao/lei%208.723-1993?OpenDocument)<sup>3</sup>

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

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

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

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



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

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

<sup>4</sup> <http://www.ethanol.org/index.php?id=79&parentid=26>

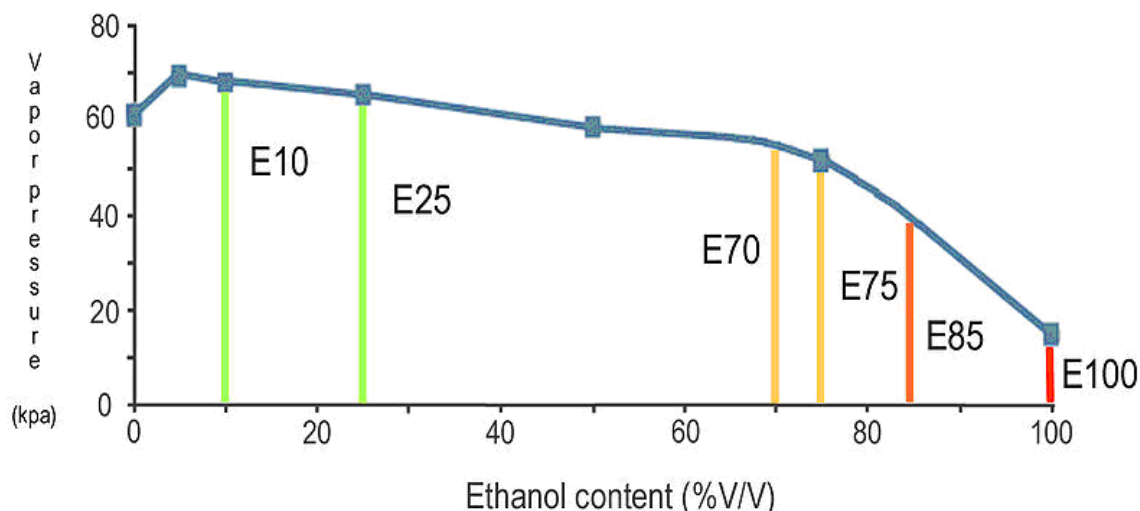


Figure 2. Relation entre le taux de bioéthanol et la pression de vapeur pour des mélanges essence/bioéthanol (Source : basé sur les données fournies par J. Bennett, Ford Motor Company 2007).

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

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

Afin d'obtenir des caractéristiques similaires à celles du gazole d'origine fossile, les huiles végétales sont transformées en présence de méthanol, grâce à une opération de transestérification, en esters méthyliques d'huiles végétales et en glycérine (0,1 t de glycérine/t d'EMHV, Figure 3 et Figure 4). Cette réaction est obtenue à l'aide d'un catalyseur (hydroxyde de sodium, de potassium ou méthoxyde de sodium  $\text{CH}_3\text{ONa}$ ), à température modérée (20-80°C) et à pression atmosphérique. Les petites molécules de bio-Diesel ainsi obtenues peuvent alors être utilisées comme carburant dans les moteurs à allumage par compression (moteur Diesel).

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

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

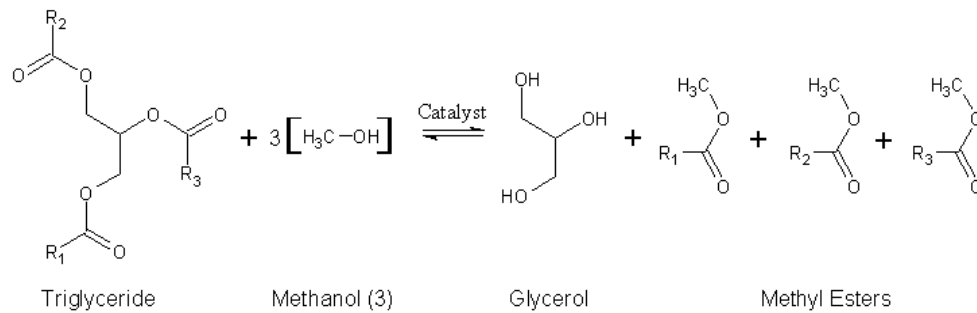


Figure 3. Transestérification d'un triglycéride par le méthanol (CH<sub>3</sub>OH).

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

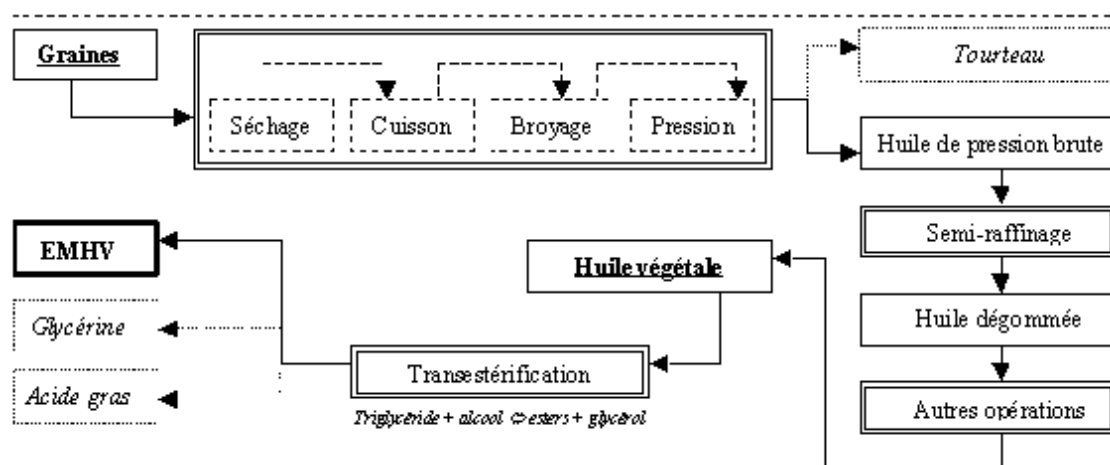


Figure 4. Procédé de fabrication d'EMHV. (Source : DGEMP)

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

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



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

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

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

En Europe, et tout particulièrement en France, la part des véhicules Diesel dans le parc automobile est aujourd'hui plus importante que celle des véhicules à essence. Le bio-Diesel qui se substitue au gazole permet donc de réduire les importations de gazole et d'améliorer la balance commerciale de la France, tout en réduisant les rejets de CO<sub>2</sub> fossile dans l'atmosphère. La stratégie de réduction de la dépendance énergétique de la France, vis-à-vis du pétrole, se justifie d'autant plus depuis les hausses des cours du pétrole en 2008.

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

### 1.3 Le cadre législatif européen

#### 1.3.1 Réduction des émissions CO<sub>2</sub> des véhicules légers

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

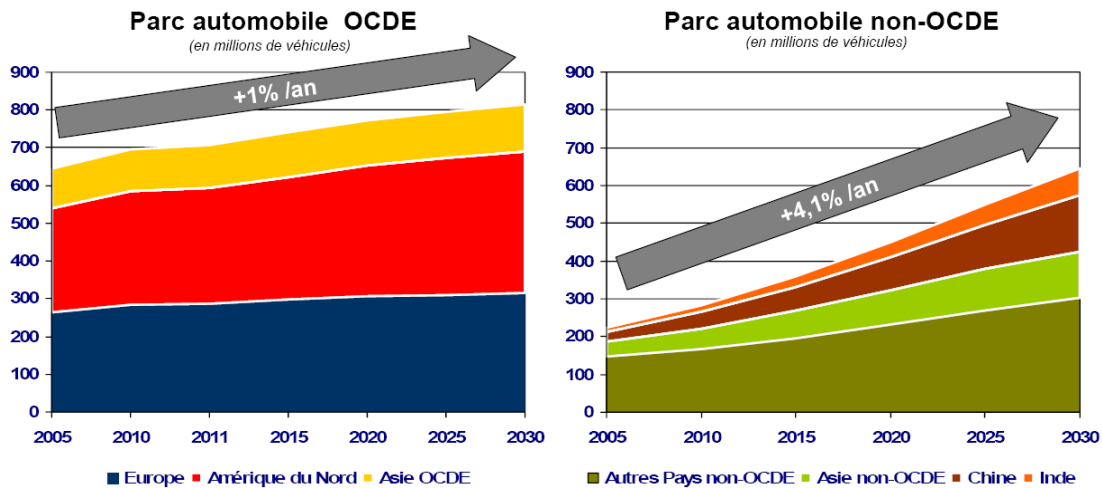


Figure 5. Evolution du parc automobile mondial. Une croissance tirée par les pays en voie de développement. (Source : TOTAL, Mosconi 2006)

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

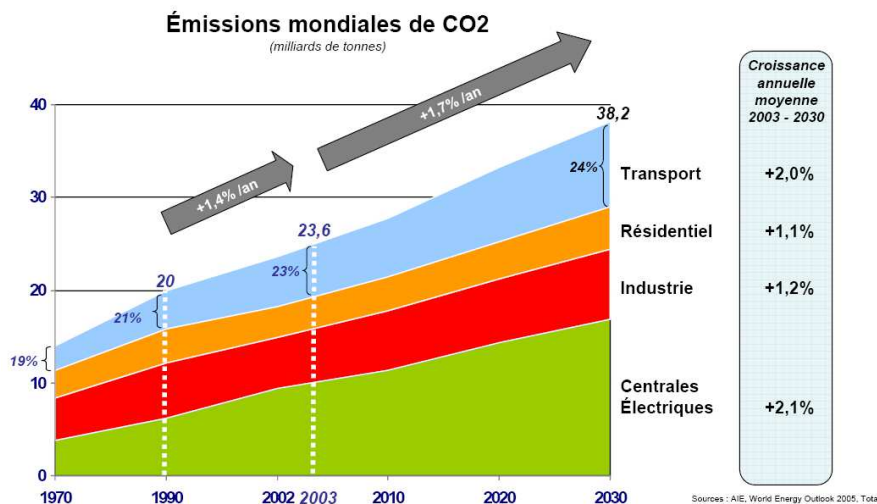


Figure 6. Evolution des émissions mondiales de CO<sub>2</sub> et prévisions à l'horizon 2030. Mosconi 2006

Pour les années à venir, l'EU a établi des stratégies (COM 07.02.07) en matière d'émissions de CO<sub>2</sub> des véhicules utilitaires légers : « Les véhicules neufs devraient réduire en moyenne leurs émissions de CO<sub>2</sub> à 140 g CO<sub>2</sub>/km (2008- 2009) et à 120 g CO<sub>2</sub>/km (d'ici à 2015) ».

### 1.3.2 Les normes antipollution

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

**Tableau 2. Récapitulatif des normes européennes EURO I à EURO VI limitant les émissions de polluants à l'échappement des véhicules Diesel neufs<sup>7</sup>. Emission en g.km<sup>-1</sup>**

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

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

### 1.3.3 L'incorporation des biocarburants dans les carburants fossiles

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

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

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

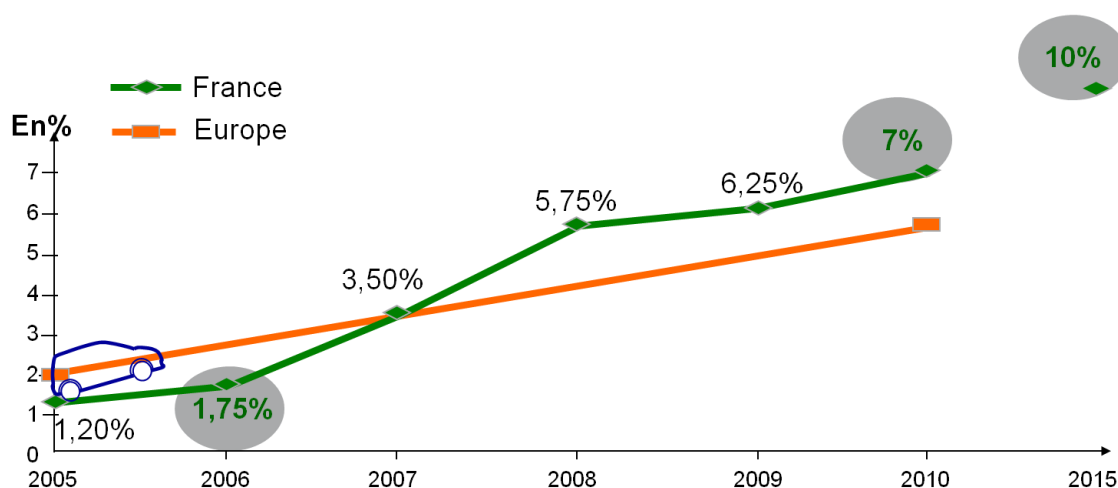


Figure 7. Taux d'incorporation de biocarburants. Cadre législatif : cas de la France (Bénézit 2007).

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

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

- 1) de **25 (en 2007) à 22 euros** par hectolitre pour les biocarburants incorporés au gazole (EMHV, esters méthyliques d'huile animale et bio-Diesel de synthèse) ; soit 220 euros par mètre cube.
- 2) de **33 (en 2007) à 27 euros** par hectolitre pour l'éthanol incorporé au supercarburant.

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

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

#### 1.4 L'offre et la demande

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

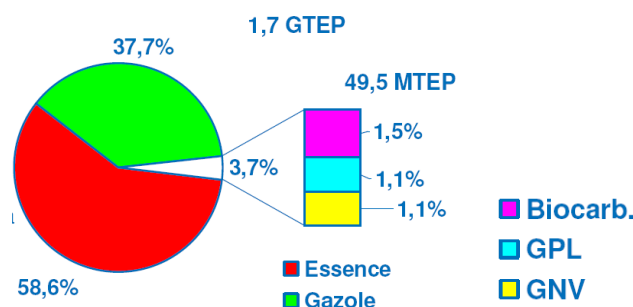
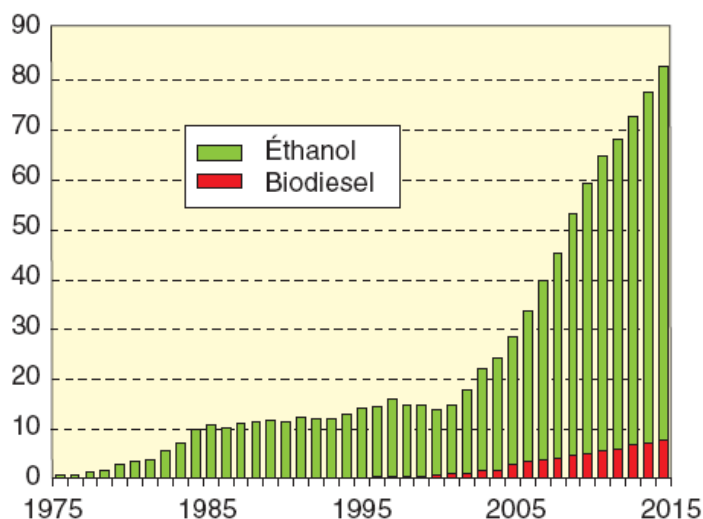


Figure 8. Consommation mondiale d'énergie dans le transport routier en 2006. (Source : IFP)

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



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

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

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

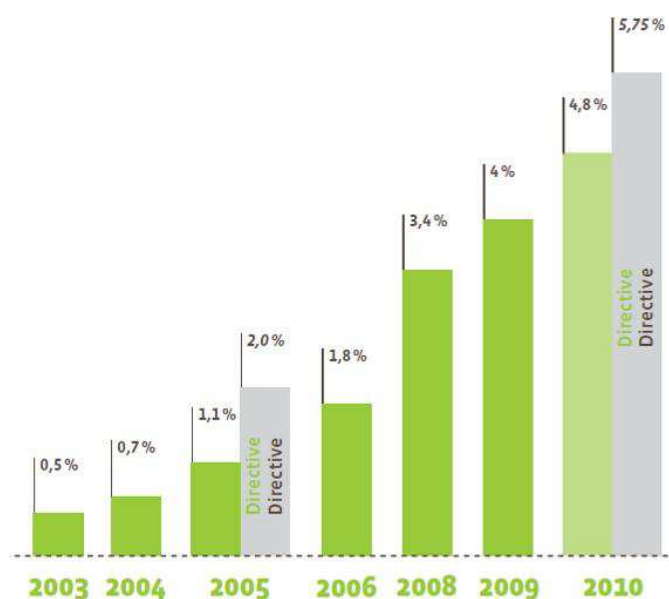
Ce comportement est lié en grande partie à l'augmentation de la consommation de gazole dans l'UE motivée par la grande efficacité des moteurs à allumage par compression, accompagnée d'une densité d'énergie volumique du carburant gazole légèrement supérieure à celle de l'essence. Aux Etats-Unis, où les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

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

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

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

(a)



(b)

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

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

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

## 1.5 L'avenir des biocarburants

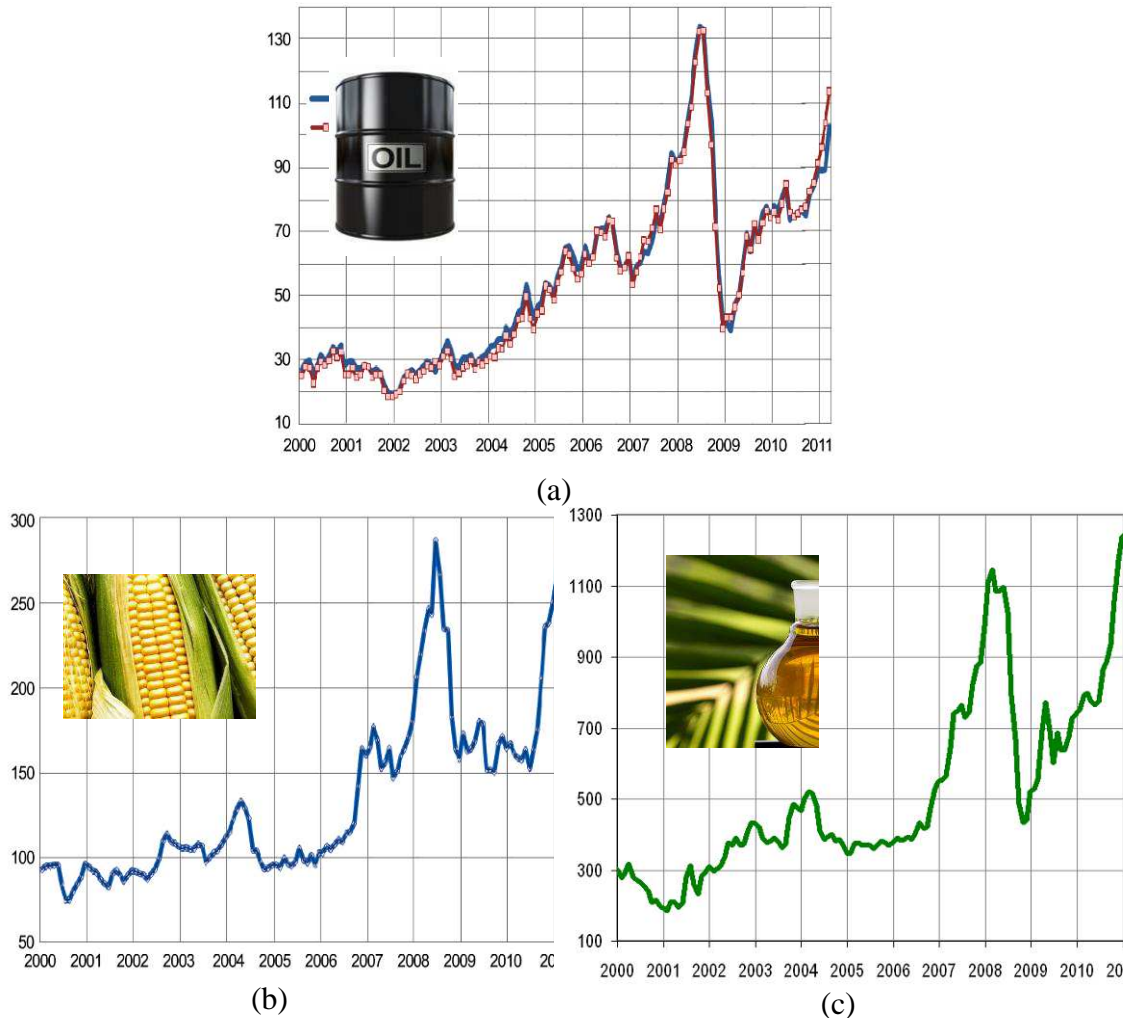
Comme mentionné précédemment, il existe principalement trois générations de biocarburants, les carburants de 1<sup>ère</sup> génération issus de sources alimentaire, les carburants de deuxième génération issus des déchets organiques, et les carburants de troisième génération issue d'algues et autres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

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

### 1.5.1 Les biocarburants de 1<sup>ère</sup> génération

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





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

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

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

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

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

### 1.5.2 Les biocarburants de 2<sup>ème</sup> génération

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

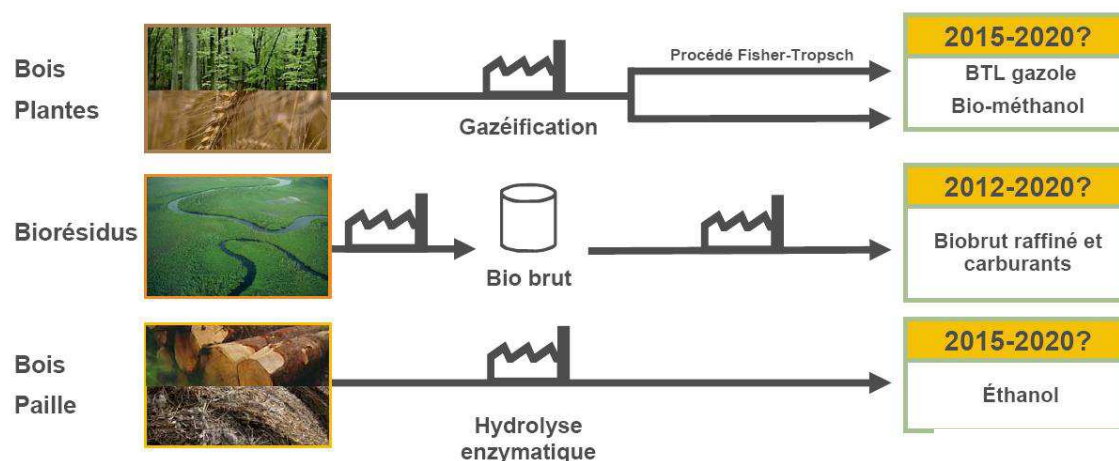


Figure 12. Biocarburants de deuxième génération. (Source : TOTAL/ENERZINE).

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

<sup>8</sup> <http://www.technologyreview.com/energy/22428/>

<sup>9</sup> <http://www.news.cornell.edu/stories/july05/ethanol.toocostly.ssl.html>

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

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

### 1.5.3 Les biocarburants de 3<sup>ème</sup> génération

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

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

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

Parmi les avantages des micro-algues, on peut citer leur grande efficacité de captation de CO<sub>2</sub>. Ainsi, une tonne d'algues a besoin de 1,8 tonne de CO<sub>2</sub> pour sa croissance. En combinant cette affinité pour le CO<sub>2</sub> avec le fait que les algues peuvent pousser presque n'importe où, beaucoup d'industries émettrices de CO<sub>2</sub> pourraient utiliser les algues pour absorber du CO<sub>2</sub> et générer du carburant. En effet, le CO<sub>2</sub> peut

<sup>10</sup> <http://www.avenirdurable.org/Les-biocarburants-de-troisieme.html>

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

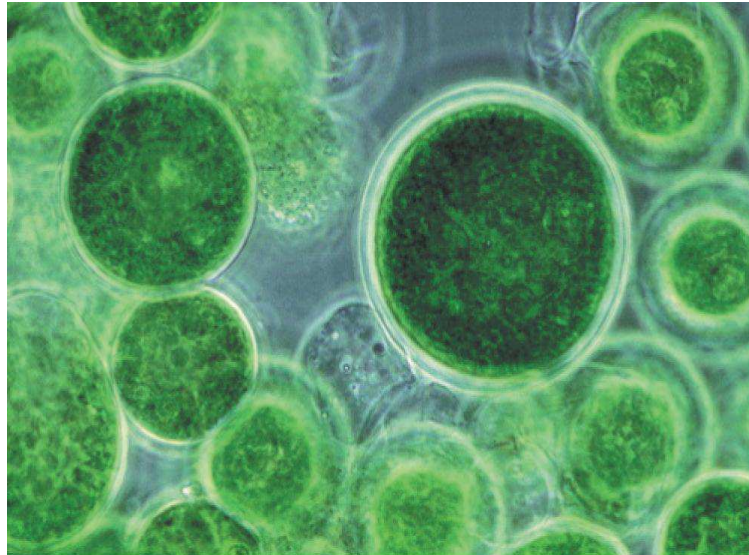


Figure 13. Vue microscopique de micro algues (source [www.devisedaily.com](http://www.devisedaily.com))

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

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



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

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

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

## ***Perspectives***

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

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



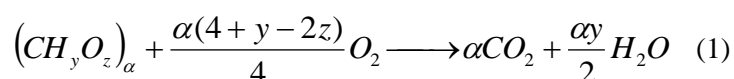


## Chapitre 2.

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

D'importantes améliorations dans la performance du moteur seront encore nécessaires pour l'incorporation de biocarburants dans le transport routier, ayant pour objectif de rejoindre les normes européenne d'émission Euro –de plus en plus strictes– ainsi que de diminuer les émissions de CO<sub>2</sub> et la consommation de carburant. Les approches de conception du moteur les plus classiques s'appuient sur le développement de prototypes qui sont encore trop longues et très coûteuses pour répondre à ces défis. Ainsi, le développement des outils informatiques tels que des modèles de combustion qui intègrent une description de la chimie réactive, incorporant la mécanique des fluides, représenterait une grande avancée dans la capacité de concevoir un moteur ayant un rendement élevé et présentant de faibles émissions de polluants.

La chimie de la combustion des hydrocarbures est un processus complexe qui comporte un grand nombre d'étapes élémentaires. Les premières molécules d'hydrocarbures réagissent pour produire une multitude d'espèces intermédiaires qui subissent des transformations chimiques et, enfin, génèrent les produits finaux, c'est-à-dire le dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>) et l'eau (H<sub>2</sub>O), mais aussi des imbrûlés, des oxydes d'azote, etc.



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

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



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

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

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

## 2.1 Généralités physico-chimiques des réactifs de départ.

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

### 2.1.1 Composition chimique du gazole

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

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

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

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

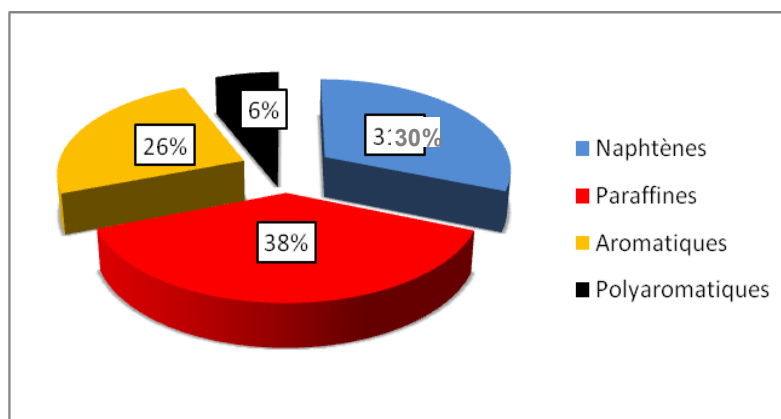


Figure 15. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un gazole commercial (source Total)

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

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

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

### 2.1.2 Composition chimique du bio-Diesel

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

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

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

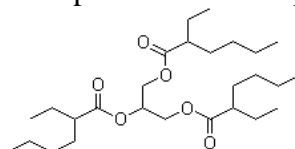


Figure 16. Glycerol tri-2-éthylhexanoate

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

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

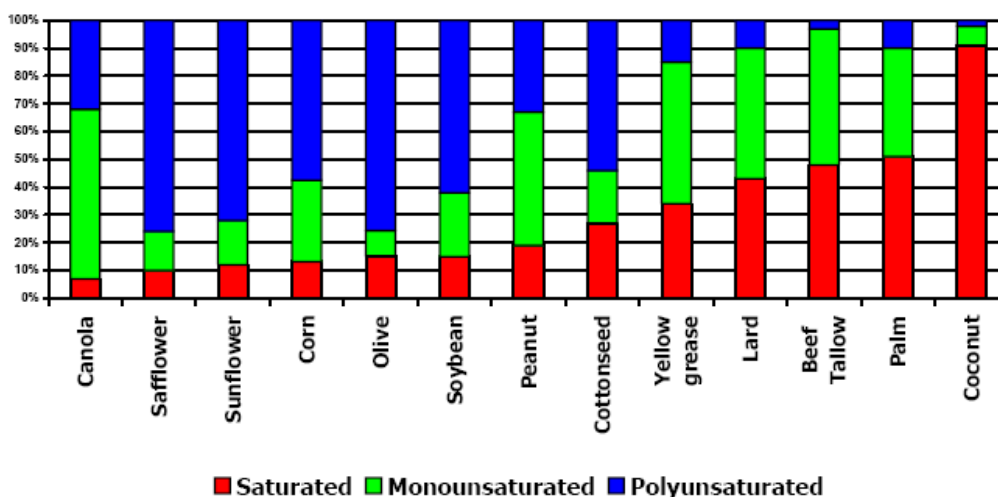
<sup>13</sup> Le vieillissement et l'oxydation du bio-Diesel peut conduire à l'augmentation de l'indice d'acide, à l'augmentation de la viscosité, et à la formation de sédiments qui bouchent les filtres. Si l'indice d'acide, la viscosité et les sédiments mesurés dépassent les limites de la norme ASTM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

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

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

	Huile de colza	Gazole
M. V. (kg/m <sup>3</sup> à 15°C)	916	820 - 845
Viscosité (mm <sup>2</sup> /s)	25,7 à 50°C	2 - 4,5 à 40°C

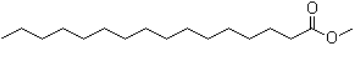
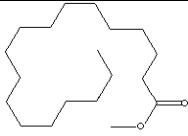
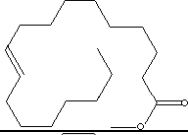

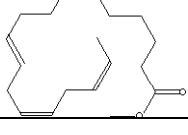
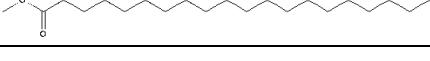
Comme il a déjà été mentionné, le bio Diesel peut être produit commercialement à partir d'une large variété d'huiles et de graisses telles que l'huile végétale de soja, de tournesol, de colza, de coton, de palme, de noix de coco, etc. Par rapport au gazole, qui contient des milliers de composés, la composition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



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

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

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

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

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



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

Comme le montre le Tableau 6 ci-dessous, les esters, auront un impact positif sur la formation de particules et la pulvérisation par des injecteurs dans la chambre de combustion car la viscosité a une influence directe sur la qualité de l'injection du carburant et donc sur la taille et la répartition des gouttelettes dans la chambre de combustion. Pour cette raison, l'huile ne peut être utilisée que pour des moteurs standards sans forte turbulence alors que l'ester lui n'est aucunement contraignant (environ 7mm<sup>2</sup>/s à 20°C). De la même façon, la température limite de filtrabilité des huiles est proche de 0°C et donc bien supérieure à celle d'un gazole commercial, ce qui risque de nuire à l'opérabilité à froid du fait de la cristallisation et/ou du colmatage de filtre sur la ligne d'injection. La masse volumique des huiles végétales étant plus élevée, les émissions de particules seront dès lors plus importantes (dans un moteur non adapté). Grâce à cette masse volumique plus élevée, le faible pouvoir calorifique massique des huiles végétales est compensé (inférieure de près de 11,5% à celui des gazoles standards). Cependant, le faible indice de cétane des huiles peut augmenter la consommation, le bruit moteur et les émissions en HC, NOx et CO<sup>14</sup>.

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

	<i>Huile de colza</i>	<i>EMC</i>	<i>Gazole</i>	<i>Impact</i>
M.V. (kg/m <sup>3</sup> à 15°C)	916	880	820 - 845	Particules
Viscosité (mm <sup>2</sup> /s)	25,7 à 50 °C	3,75 à 50°C	2-4,5 à 40°C	Pulvérisation
TLF France/Hiver (°C)	Non mesurable	-12	-15	Opération à froid
PCI (MJ/kg)	37,4	37,7	42,6	Perte
PCI (MJ/l)	34,3	33,2	35,8	Puissance
Distillation (% à 350°C)		≥ 95	≥ 85	(-)
Indice de cétane	32-36	48,7	≥ 51	Consommation

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

<sup>14</sup> RENAULT DIM -DAPEM

Tableau 7. Spécifications des mélanges gazole-bio-Diesel

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

(\*) spécification proposée par la DIREM (France)

(\*\*) spécification interne à TOTAL pour un B30 en 2006

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

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

### 2.2.1 Composition d'un mélange par famille chimique

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

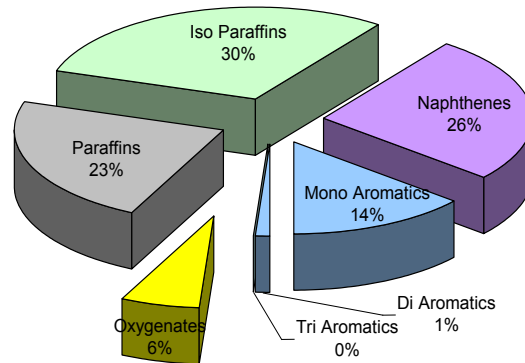


Figure 19. Exemple de composition moyenne en pourcentage massique d'un B10 commercial (source SGS).

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

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

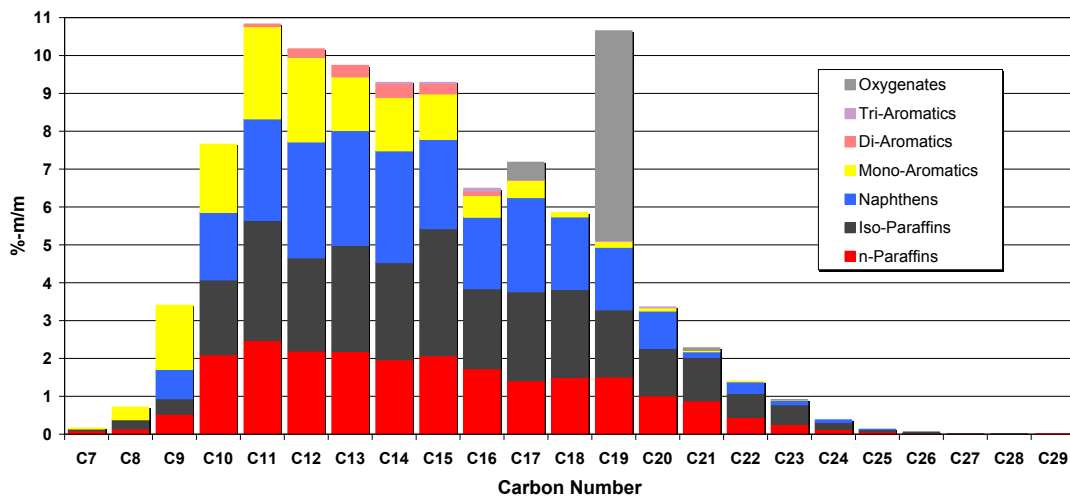


Figure 20. Analyse détaillée des hydrocarbures composant un carburant B10. Distribution par famille chimique (source SGS/RENAULT).

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

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



Schönborn *et al.* 2009 ont étudié avec plus de détail l'influence de la structure moléculaire des esters de méthyle sur la combustion dans des conditions de fonctionnement d'un moteur du type Diesel. Ils ont observé que la structure moléculaire du carburant influençait fortement la formation de NO<sub>x</sub> et de particules, et leur concentration dans les gaz d'échappement. Ainsi, les émissions de particules augmentent avec le nombre de doubles liaisons et la taille de la molécule (Figure 21).

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

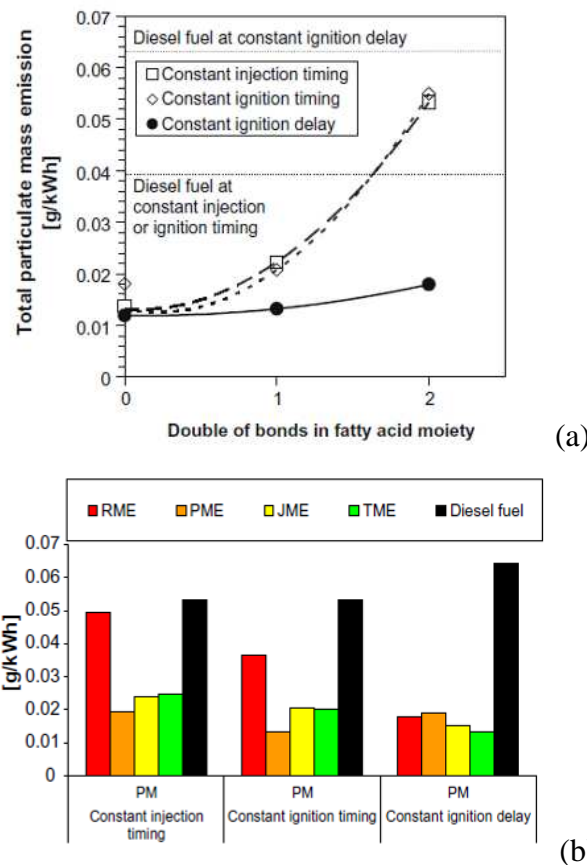


Figure 21. Emission des particules (a) en fonction du nombre d'insaturation sur la chaîne carbonée et (b) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique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

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

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

Zhang *et al.* 2009 se sont intéressés à l'effet de la position de la double liaison dans la chaîne aliphatique d'ester d'acide gras. Ils ont analysé le comportement à l'allumage de quatre esters d'acide gras C<sub>9</sub> différents: nonanoate d'éthyle, nonanoate de méthyle, 2-nonénoate de méthyle et 3-nonénoate de méthyle. Les résultats ont montré que ces quatre acides gras présentaient des caractéristiques d'allumage moteur très différentes. Ainsi, lorsque l'insaturation s'approche du centre de la chaîne aliphatique, l'ester d'acide gras présente une baisse de réactivité se manifestant par un retard à l'allumage, un plus faible dégagement de chaleur et une formation prématurée de CO<sub>2</sub>. Ces effets ont été clairement observés dans le régime de combustion à basse température.

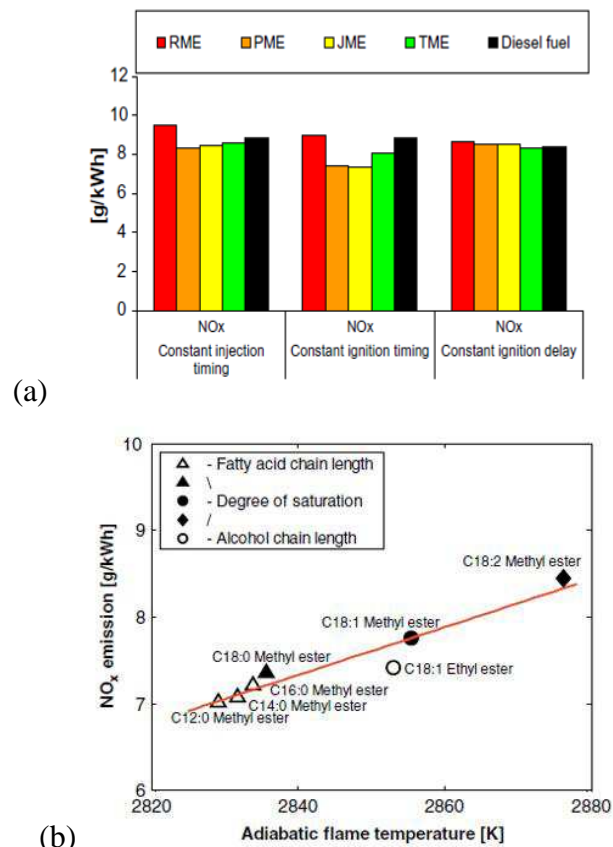


Figure 22. Emission de NOx (a) pour un gazole fossile et quatre différents types de bio-Diesel : ester méthylique d'huile de palme (PME), ester méthylique d'huile de jatropha (JME), ester méthylique de suif (TME) et ester méthylique d'huile de colza (RME) et (b) en fonction de la température de flamme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

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

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

## 2.4 Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures

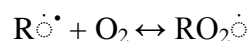
Les mécanismes cinétiques d'oxydation des hydrocarbures sont le résultat de nombreuses études consacrées à la modélisation détaillée de l'oxydation d'un grand nombre de molécules de carburant. On peut citer les travaux concernant l'oxydation du *n*-heptane et de l'iso-octane, Ranzi *et al.* 1995, Curran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

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

- R<sup>•</sup> dénote les radicaux alkyles ou les espèces C<sub>n</sub> H<sub>2n+1</sub>
- R' ou Q dénote les espèces C<sub>n</sub> H<sub>2n</sub>
- R'' ou Q' dénote les espèces C<sub>n</sub> H<sub>2n-1</sub>

### 2.4.1 Mécanisme d'oxydation à basses températures

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



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

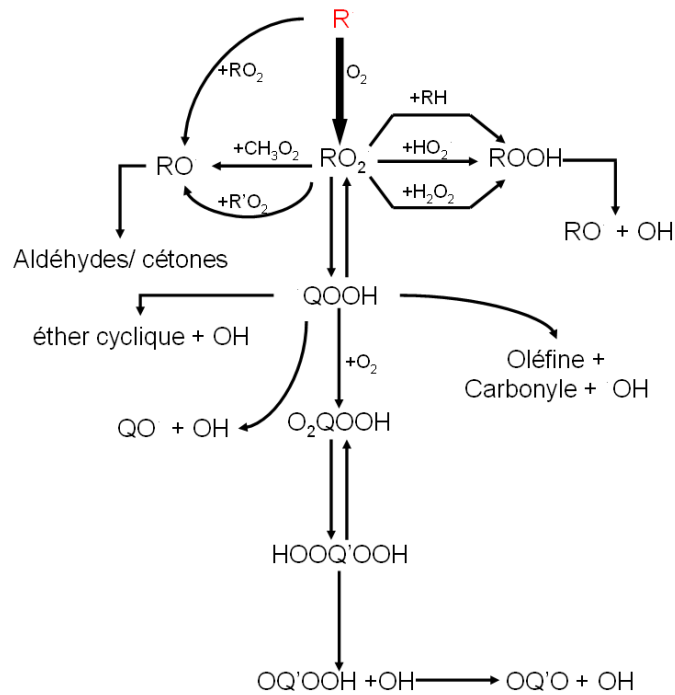
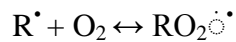


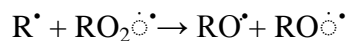
Figure 23. Voies de réaction à base température (Griffiths *et al.* 1995).

Le schéma développé comprend les processus suivants :

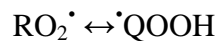
1. Addition d'oxygène moléculaire aux radicaux alkyles.



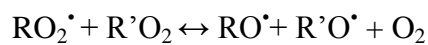
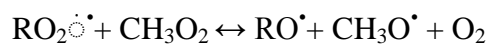
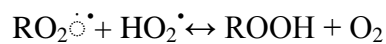
2. Réaction des radicaux alkyles avec les radicaux alkylpéroxy.



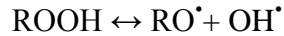
3. Isomérisation de radicaux alkylpéroxy



4. Réaction de radicaux RO<sub>2</sub> avec des espèces actives.



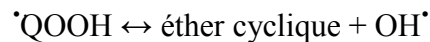
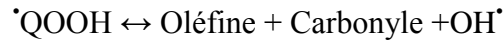
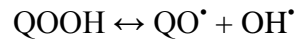
5. Rupture homolytique O–O de ROOH.



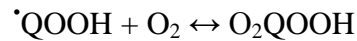
6. Décomposition de radicaux alcoxy.



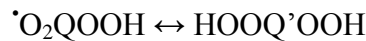
7. Décompositions du radicaux QOOH.



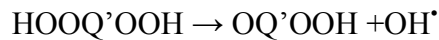
8. Addition de QOOH à l'O<sub>2</sub>



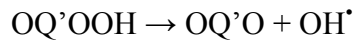
9. Isomérisation de O<sub>2</sub>QOOH



10. Rupture homolytique O–O de HOOQ'OOH



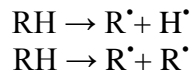
11. Décomposition des cétohydropéroxydes.



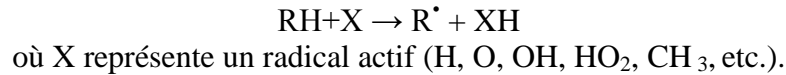
Entre la cinétique d'oxydation à basse et haute températures, il existe une zone nommée « **Coefficient Négatif de Température** », NTC (Figure 24). Dans cette zone la réactivité diminue à cause du ralentissement de réactions de ramification avec l'augmentation de la température (Ristori 2000). Cela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



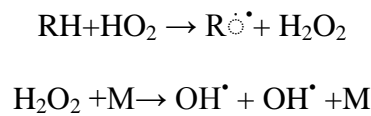
1. Décomposition unimoléculaire du carburant.



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

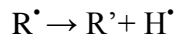


Les radicaux HO<sub>2</sub>, formés dans la zone de coefficient négatif de température, avec l'augmentation de température de réaction donnent suite à une augmentation de la réactivité (Ristori 2000). Le processus de ramification établi est :

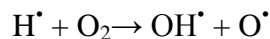


Les deux radicaux OH libérés vont attaquer les molécules de carburant, permettant à la cinétique d'oxydation de celui-ci d'augmenter fortement.

3. Décomposition de radicaux alkyle.

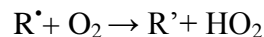


De plus, les radicaux H réagissent avec l'oxygène pour produire des radicaux O<sup>•</sup> et OH qui, comme il a déjà été mentionné, augmentent la vitesse d'oxydation du carburant :

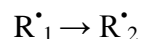


Cette réaction dite de ramification multiplie les centres actifs ; elle est responsable de l'emballement réactionnel.

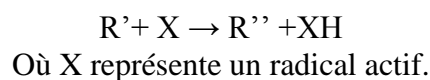
4. Oxydation de radicaux d'alkyles pour former une oléfine et HO<sub>2</sub>.



5. Isomérisation de radicaux alkyles.

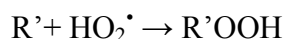
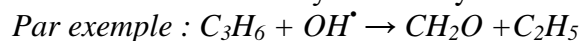
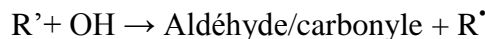
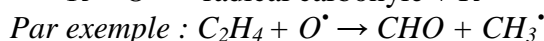


6. Arrachement d'H à partir d'oléfines.

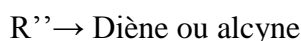


7. Addition d'espèces radicalaires aux oléfines.





8. Décomposition de radicaux oléfiniques.



9. Décomposition d'oléfines.



## 2.5 Composés purs utilisés comme carburant modèle

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

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

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

- Faisabilité : Les molécules candidates doivent avoir fait l'objet d'études établissant leurs mécanismes cinétiques détaillés d'oxydation.
- Simplicité : Principalement pour des raisons de temps et de capacité de calcul, les mélanges modèles doivent être composés par des molécules « simples » qui représentent les familles chimiques principales des carburants. Par exemple : paraffines avec moins de 12 atomes de carbone, paraffines



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

- **Similarité** : Il est nécessaire que le nouveau mélange ait des propriétés physiques et chimiques semblables au carburant : volatilité (comme le point d'ébullition et le point éclair) ; formation des suies ; propriétés de combustion (comme la chaleur de combustion et les limites d'inflammabilité) ; etc.
- **Coût et disponibilité** : Dans le cas des carburants modèles de type gazole, la présence de paraffines de plus de 12 atomes de carbone et de composés naphthéniques pourraient être envisagée. En bref, il est nécessaire d'évaluer le coût de la formulation du nouveau mélange modèle, la possibilité d'utiliser les principaux dispositifs nécessaires à la création de bases de données expérimentales (e.g. tube à choc, machine à compression rapide, brûleur, réacteur auto-agité) et les outils de modélisation.

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

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

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

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

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

**Tableau 8. Quelques exemples de carburants modèles développés dans des modèles cinétiques.**

Carburant réel	Carburant modèle	$\rho$ (g/mL) à 293 K	Indice de cétane	Famille chimique
Essence*	<i>n</i> -heptane C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	0,684	56	Paraffines
	Iso-octane	0,688	—	Iso-paraffines
	Iso-octane/ toluène/ 1-hexène/ETBE <sup>15</sup>	~0,690		Iso-paraffines/aromatiques
	1-hexène/toluène	~0,685		Paraffines/aromatiques
	1-hexène/iso-octane	~0,685		Paraffines/iso-paraffines
Gazole**	<i>n</i> -cétane	0,773	100	Paraffines
	1-Methylnaphtalène	1,001	0	Poly- aromatiques
	0,7 <i>n</i> -décane/ 0,3 1-Methylnaphtalène	0,817	55	Paraffines/ aromatiques
	<i>n</i> -décane/ <i>n</i> -propylcyclohexane/ <i>n</i> -butylbenzène	0,778		Paraffines/ naphtènes/ aromatiques
	<i>n</i> -décane/ <i>n</i> -butylbenzène	0,774		Paraffines/aromatiques
	<i>n</i> -décane/ <i>n</i> -propylcyclohexane	0,750		Paraffines/ naphtènes
Bio-Diesel***	Octanoate de méthyle	0,890	33.6	Esters
	Decanoate de méthyle	0.871	47.7	Esters

\* Curran *et al.* 1998; Su *et al.* 2005; Curran *et al.* 2002 ; Yahyaoui *et al.* 2007; Yahyaoui *et al.* 2007 et Vanhove *et al.* 2006.

\*\* [Mati *et al.* 2005] ; Mati *et al.* 2007 et Diévert 2008.

\*\*\* Silke *et al.* 2007; Herbinet *et al.* 2008 et HadjAli *et al.* 2009.

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

<sup>15</sup> Ethyle Tertio-Butyle Ether

### 2.5.1 Oxydation du *n*-décane

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

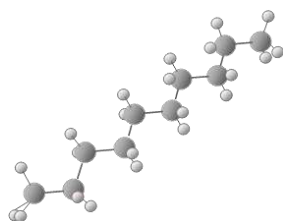


Figure 26. Molécule de *n*-décane

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

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

Douté *et al.* (1997) ont mesuré sur un brûleur à flamme plate la structure d'une flamme pré-mélangée de *n*-décane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>, pour une richesse de 1,7. Ils ont décrit en détail la consommation de molécules d'hydrocarbures et les réactions de quelques radicaux. Ce mécanisme comprend 78 espèces et 638 réactions.

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

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

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

**Tableau 9. Oxydation du *n*-décane**

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

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

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

### 2.5.2 Oxydation du 1-méthylnaphtalène

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

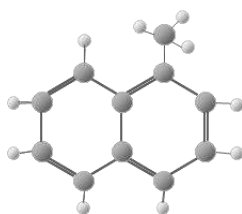


Figure 27. Molécule d' 1-méthylnaphtalène

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

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

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

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

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

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

Au CNRS d'Orléans, les travaux menés par Mati *et al.* (2007), faisant suite aux travaux de Ristori *et al.* en 2000, ont montré que la réactivité du 1-méthylnaphtalène à basse température est faible, quelque soit la pression. Ils ont aussi montré que les produits majoritaires d'oxydation consistent en des espèces di-aromatiques telles que le naphtalène (C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>) et le naphtaldéhyde (C<sub>10</sub>H<sub>7</sub>HCO). Egalement, ils ont développé un mécanisme pour l'oxydation du 1-méthylnaphtalène comportant 146 espèces et 1041 réactions, où la plupart sont réversibles.

Tableau 10. Oxydation du 1-méthylnaphtalène.

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

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

### 2.5.3 Oxydation des esters méthyliques

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

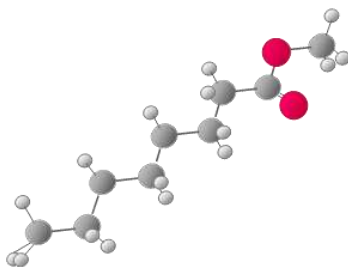


Figure 28. Schéma représentatif d'une molécule d'octanoate de méthyle

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

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

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

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



Tableau 11. Oxydation des Méthyle esters

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

De nouvelles recherches ont vu le jour et des expériences plus récentes ce sont concentrées sur des esters méthyliques à plus longue chaîne. Ainsi, en 2008 Herbinet *et al.* ont développé un mécanisme détaillé de l'oxydation du décanoate de méthyle. Ce modèle a été comparé avec des résultats de l'oxydation des esters méthyliques d'huile de colza obtenus précédemment et, il est capable de prédire la formation de CO et de CO<sub>2</sub> dans la zone froide. Un an après, en 2009, Dayma *et al.* ont développé un mécanisme de combustion détaillé de l'heptanoate de méthyle. Il s'agit d'une version révisée du modèle précédent d'oxydation de l'hexanoate de méthyle (2008) qui compte 1087 espèces et 4592 réactions réversibles. Enfin, en 2010, Togbé a présenté un mémoire de thèse où il a étudié l'oxydation en réacteur agité par jets gazeux de 11 esters méthyliques (du butanoate de méthyle au décanoate de méthyle)



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

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

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

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

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

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

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

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

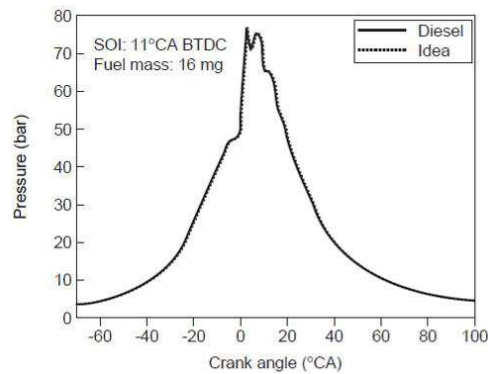


Figure 29. Comparaison des pressions obtenues pour un gazole et un IDEA-fuel. Barths *et al.* 1999.

Les expériences ont également montré que les tendances des émissions de l'IDEA-fuel étaient semblables à celles d'un gazole réel avec une légère sous-estimation en NO<sub>x</sub> (3-7%) et en suie (10-30%) par rapport au gazole fossile (Figure 30a et b).

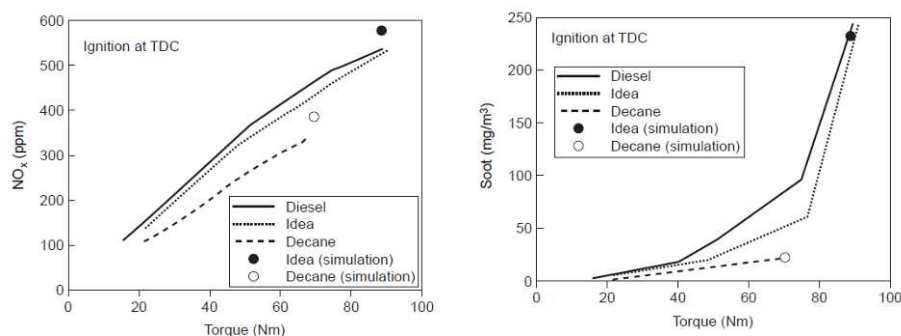


Figure 30. Concentration dans les gaz d'échappement de a) NO<sub>x</sub> et b) Suie pour différents carburants. Barths *et al.* 1999.

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

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

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

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

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

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

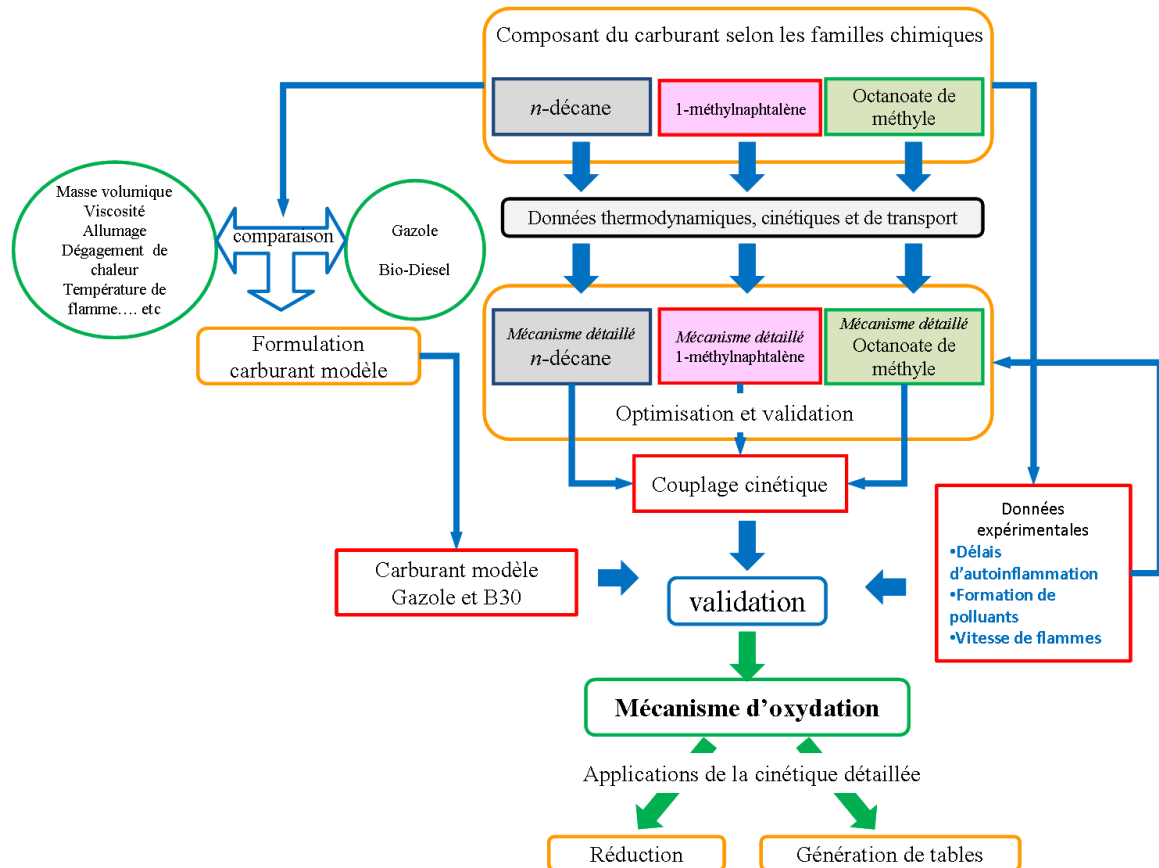
**Tableau 14. Propriétés physico-chimiques de carburant modèle B30 comparées à celles du B30**

Propriété	$C_{9,91}H_{18,28}O_{0,6}$	B30	Impact
H/C	1,9	1,9	-
M (kg/kmol)	146,8	-	-
M.V. (kg/m <sup>3</sup> )	820	850	Particules
PCI (MJ/kg)	≤ 44.240	42	Puissance
Cetane no. C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	76 0 33.6	~ 48 51	Cosom.

## *Applications de la Cinétique Chimique Détaillée*

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

- De faire d'abord une sélection d'un nombre minimum d'espèces représentatives des familles chimiques présentes dans le carburant.
- De formuler les carburants modèles en ciblant les propriétés physico-chimiques et le comportement de la combustion des carburants réels.
- D'obtenir une grande quantité de données expérimentales pour chaque composant primaire, des différents mélanges du carburant modèle formulé ainsi que des carburants réels.
- De développer, d'optimiser et de coupler les mécanismes détaillés de toutes les espèces choisies.
- De valider le mécanisme résultant avec les données expérimentales des carburants modèles, ainsi que de le revalider avec les résultats obtenus pour les composés primaires du mélange.
- De développer différentes méthodes (réductions et tabulation de la chimie) pour des **applications spécifiques** des données cinétiques dans un modèle de combustion 3D complexe.



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

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

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

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

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

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

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

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

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

---

<sup>17</sup> <http://www.em2c.ecp.fr/combustion/c2>

## Conclusion

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

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

## Chapitre 3

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

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

#### 3.1 Description du réacteur auto-agité JSR

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

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

---

<sup>18</sup> La température mesurée dans le réacteur est utilisée dans les simulations.



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

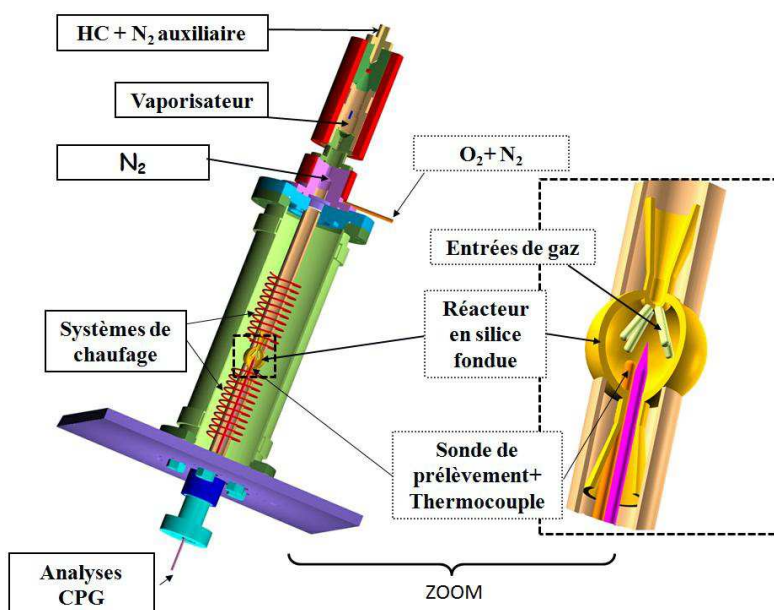


Figure 32. Réacteur auto-agité par jets gazeux (ou Jet Stirred Reactor, JSR).

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

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

### 3.1.1 Principe de fonctionnement

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

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

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

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

Où :

$\tau$	est le temps de passage moyen des gaz (s)
$V_r$	est le volume du réacteur (m <sup>3</sup> )
$Q$	est le débit volumétrique total à l'entrée du réacteur (m <sup>3</sup> /s)
$T_{amb}$	est la température ambiante (K)
$T$	est température imposée (K)
$P_{atm}$	est la pression ambiante (bar)
$P$	est la pression imposée (bar)

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

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

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

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

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

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

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

### 3.1.2. Techniques d'analyse des gaz

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

La chromatographie en phase gazeuse a été employées en ligne et en parallèle pour permettre le dosage de l'hydrogène et l'oxygène ; ainsi que celui des composés hydrocarbonés légers (moins de 7 carbones), lourds et oxygénés. Tous les chromatographes utilisés ont été calibrés à l'aide d'étalons externes. La spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier a été utilisée en ligne, permettant le dosage de CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CH<sub>2</sub>O, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, et C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>.

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

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

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

<b>Chromatographe</b>	<b>Colonnes</b>	<b>Gaz vecteur</b>	<b>Programmation de température</b>	<b>Détecteur</b>	<b>Composés détectés</b>
Varian 3300	CP-CarboPLOT P7 L = 25 m D <sub>int</sub> = 0,53 mm D <sub>f</sub> = 50 µm	N <sub>2</sub> 15 mL.mm <sup>-1</sup>	T=50°C t = 5 mn isotherme	TCD	H <sub>2</sub>
Varian 3400	CP-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /KCl L = 50 m D <sub>int</sub> = 0,32 mm D <sub>f</sub> = 5 µm	He 1,5 mL.mm <sup>-1</sup>	T <sub>i</sub> =70°C t <sub>i</sub> =0 mn v=10°C/mn T <sub>f</sub> =200°C t <sub>f</sub> =20 mn	FID	HC<C7
Varian 3800	DB-5MS L = 50 m D <sub>int</sub> = 0,25 mm D <sub>f</sub> = 1 µm	He 1 mL.mm <sup>-1</sup>	T <sub>i</sub> =50°C t <sub>i</sub> =5 mn v=10°C/mn T <sub>f</sub> =150°C t <sub>f</sub> =10 mn	FID + Saturn 2000 (MS)	Analyse en ligne HC + Oxygénés

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

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

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

### 3.2 Méthodologie

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

1	Vr (L)	0,033										
2	T (K)	293										
3	$\tau$ (ms)	1000	a×C10.3H18.4+14.9a×O2 = 10.3a×CO2+9.2a×H2O									
4	$\phi$	1,00										
5	P(bar)	10										
6												
7				débits réactifs (L/h)			cm <sup>3</sup> .min <sup>-1</sup>	Affichage débitmètre (V)			HPLC	
8	Exp #	T (K)	Q <sub>tot</sub> (L/h)	N2 aux.	N2 pr.	O2	Carbu	N2 aux.	N2 pr.	O2	Carbu	T(°C)
9								5850 TR 9101 00051/7	5850 TR 9101-00063/ 17	5850 E T10763/006 500 cc/min		
10												
11												
12	1	560	621,6	100,00	511,70	9,26	0,07663	1,464	1,927	1,385	0,077	287
13	2	590	590,0	100,00	480,59	8,79	0,07273	1,464	1,804	1,315	0,073	317
14	3	620	561,4	100,00	452,50	8,37	0,06922	1,464	1,694	1,252	0,069	347
15	4	650	535,5	100,00	427,00	7,98	0,06602	1,464	1,594	1,194	0,066	377
16	5	680	511,9	100,00	403,75	7,63	0,06311	1,464	1,503	1,142	0,063	407
17	6	710	490,3	100,00	382,46	7,30	0,06044	1,464	1,419	1,094	0,060	437
18	7	740	470,4	100,00	362,90	7,01	0,05799	1,464	1,343	1,050	0,058	467
19	8	770	452,1	100,00	344,87	6,74	0,05573	1,464	1,273	1,009	0,056	497
20	9	800	435,1	100,00	328,19	6,48	0,05364	1,464	1,207	0,972	0,054	527
21	10	835	416,9	100,00	310,24	6,21	0,05139	1,464	1,138	0,931	0,051	562
22	11	870	400,1	100,00	293,74	5,96	0,04933	1,464	1,073	0,894	0,049	597
23	12	905	384,6	100,00	278,51	5,73	0,04742	1,464	1,014	0,860	0,047	632
24	13	945	368,3	100,00	262,49	5,49	0,04541	1,464	0,952	0,824	0,045	672
25	14	985	353,4	100,00	247,77	5,27	0,04357	1,464	0,895	0,791	0,044	712
26	15	1030	337,9	100,00	232,57	5,04	0,04166	1,464	0,836	0,756	0,042	757
27	16	1075	323,8	100,00	218,65	4,82	0,03992	1,464	0,782	0,725	0,040	802
28	17	1120	310,8	100,00	205,85	4,63	0,03832	1,464	0,733	0,696	0,038	847

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

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

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

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

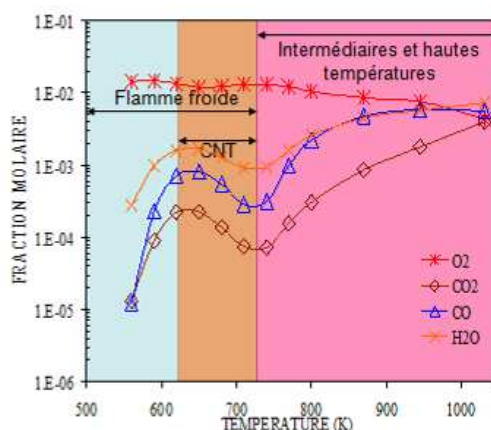


Figure 34. Evolution de la formation des espèces en fonction de la température lors de l'oxydation du carburant modèle de type gazole (70% de *n*-décane+30% 1-méthylnaphtalène).

Les expériences réalisées avec ce dispositif ont permis de suivre l'évolution de la concentration des espèces dans un intervalle de température allant de 560 à 1030K, depuis le début de l'oxydation jusqu'à l'apparition d'une concentration de CO<sub>2</sub> supérieure à celle de CO en milieu pauvre et stœchiométrique. Ces expériences ont été réalisées avec deux carburants réels (gazole et B30), ainsi que pour les carburants modèles représentatifs du gazole (70%<sub>mol</sub> de *n*-décane et 30%<sub>mol</sub> de 1-méthylnaphtalène) et du B30 (49%<sub>mol</sub> de *n*-décane, 21%<sub>mol</sub> de 1-méthylnaphtalène et 30%<sub>mol</sub> méthyle octanoate).

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

### 3.3 Résultats expérimentaux

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

Tableau 16. Conditions expérimentales étudiées en JSR.

<i>Carburant</i>	<i>Fraction molaires (ppm)</i>				<i>T (K)</i>	$\phi$	$\tau$ (s)	<i>P (bar)</i>
	<i>C<sub>10</sub>H<sub>22</sub></i>	<i>C<sub>11</sub>H<sub>10</sub></i>	<i>C<sub>9</sub>H<sub>18</sub>O<sub>2</sub></i>	<i>Carburant</i>				
Gazole C <sub>15,64</sub> H <sub>29,34</sub>		–		650	560- 1030	0,25 - 1,5	1 et 0,6	10
B30 C <sub>16,47</sub> H <sub>30,83</sub> O <sub>0,51</sub>		–		600	560- 1030	0,25 - 1	1 et 0,6	10
Gazole Modèle C <sub>10,3</sub> H <sub>18,4</sub>	700	300	0	1000	560- 1030	0,25- 1,5	1 et 0,6	10 et 6
B30 Modèle C <sub>9,91</sub> H <sub>18,28</sub> O <sub>0,6</sub>	490	210	300	1000	560- 1030	0,25-1,5	1 et 0,6	10 et 6

### 3.3.1 Oxydation du gazole commercial

#### a) Conditions expérimentales

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

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

<i>Fractions molaires (ppm)</i>				
<i>Gazole</i>	<i>O<sub>2</sub></i>	<i>N<sub>2</sub></i>	$\phi$	<i>P (bar)</i>
650	0,0597	0,9396	0,25	10
650	0,0299	0,9695	0,5	10
650	0,0149	0,9844	1	10
650	0,0100	0,9894	1,5	10

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



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

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

b) *Résultats expérimentaux*

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

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

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



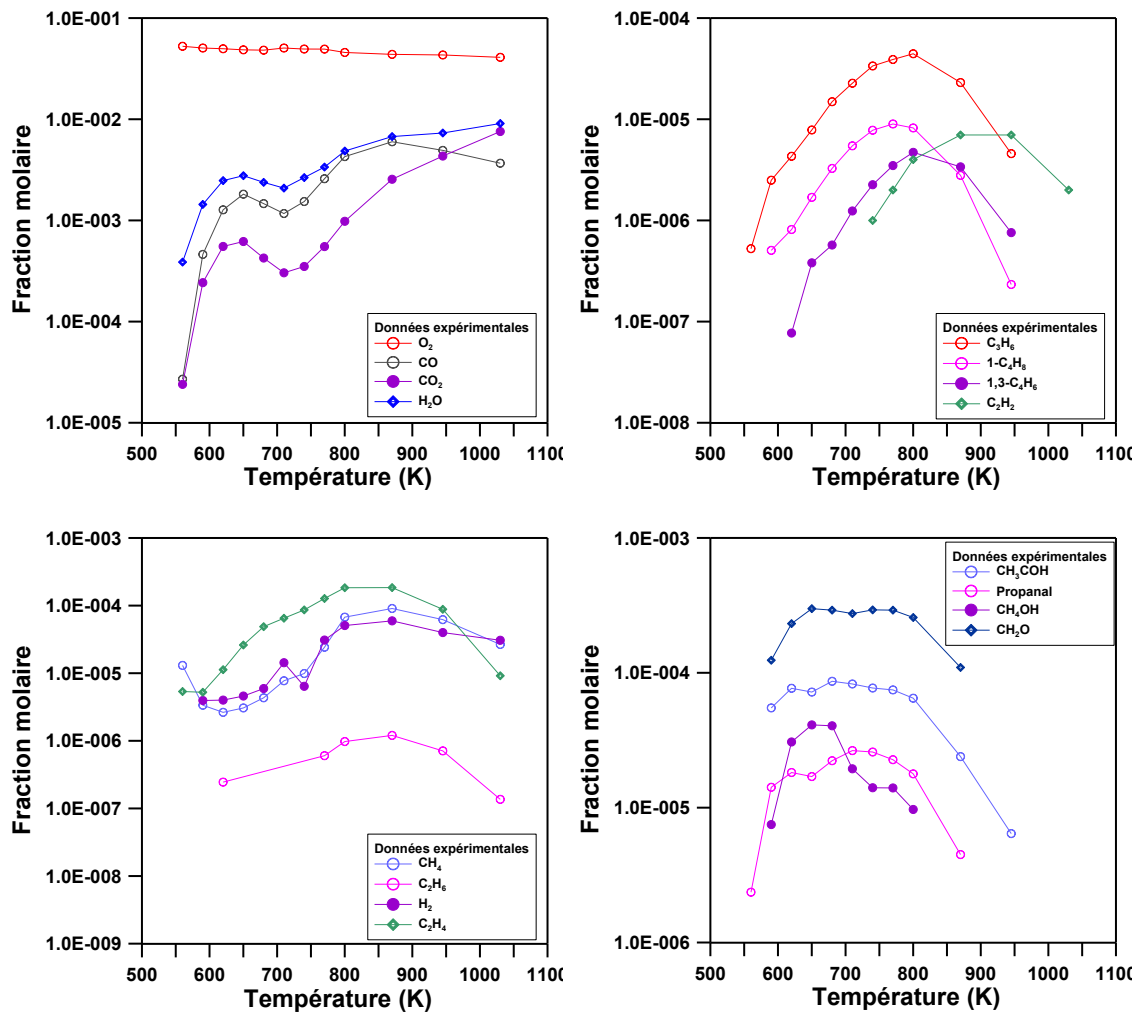


Figure 35. Oxydation du gazole réel en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=0,25$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,065\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

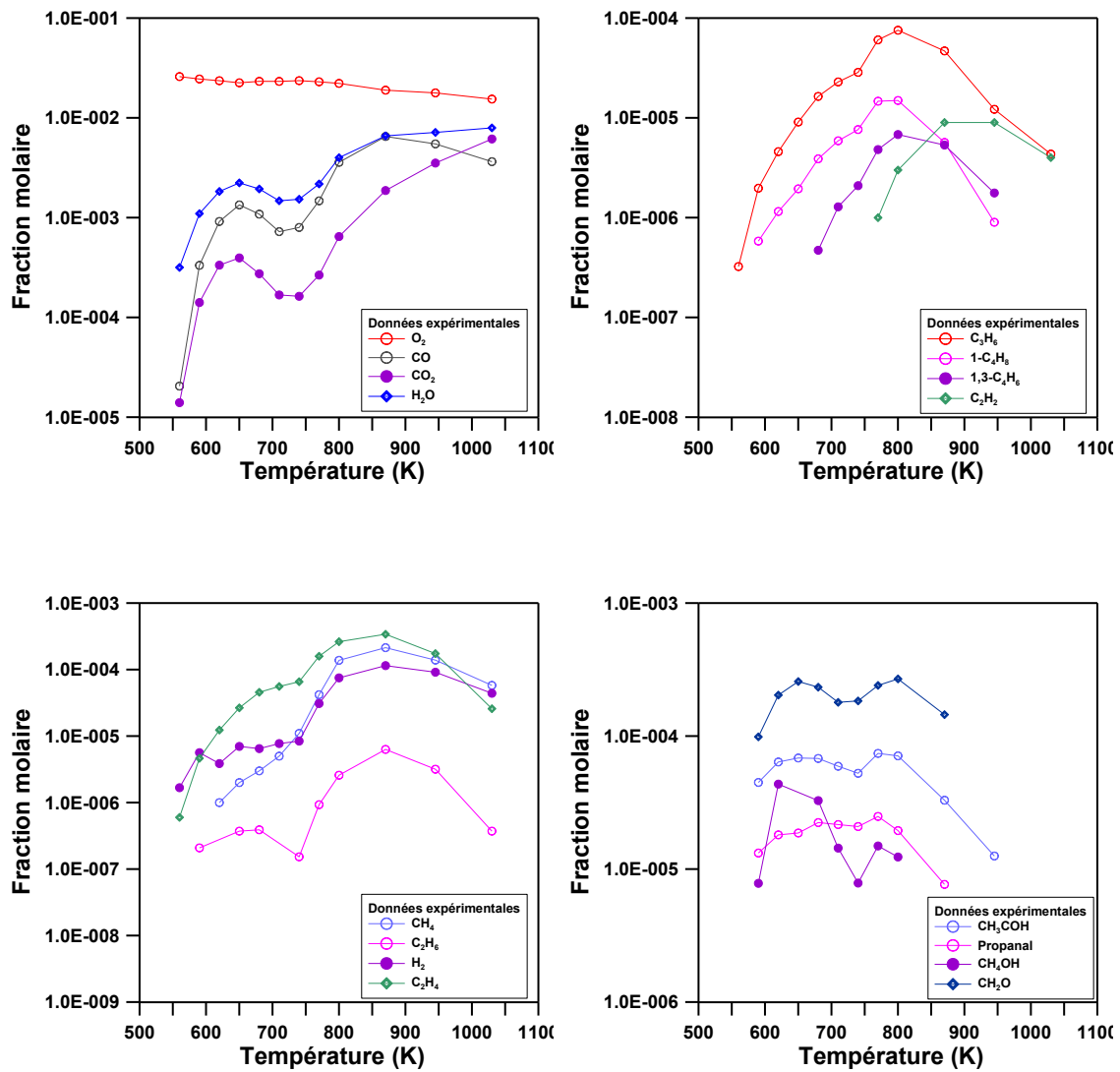


Figure 36. Oxydation du gazole réel en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=0,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}= 0,065\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

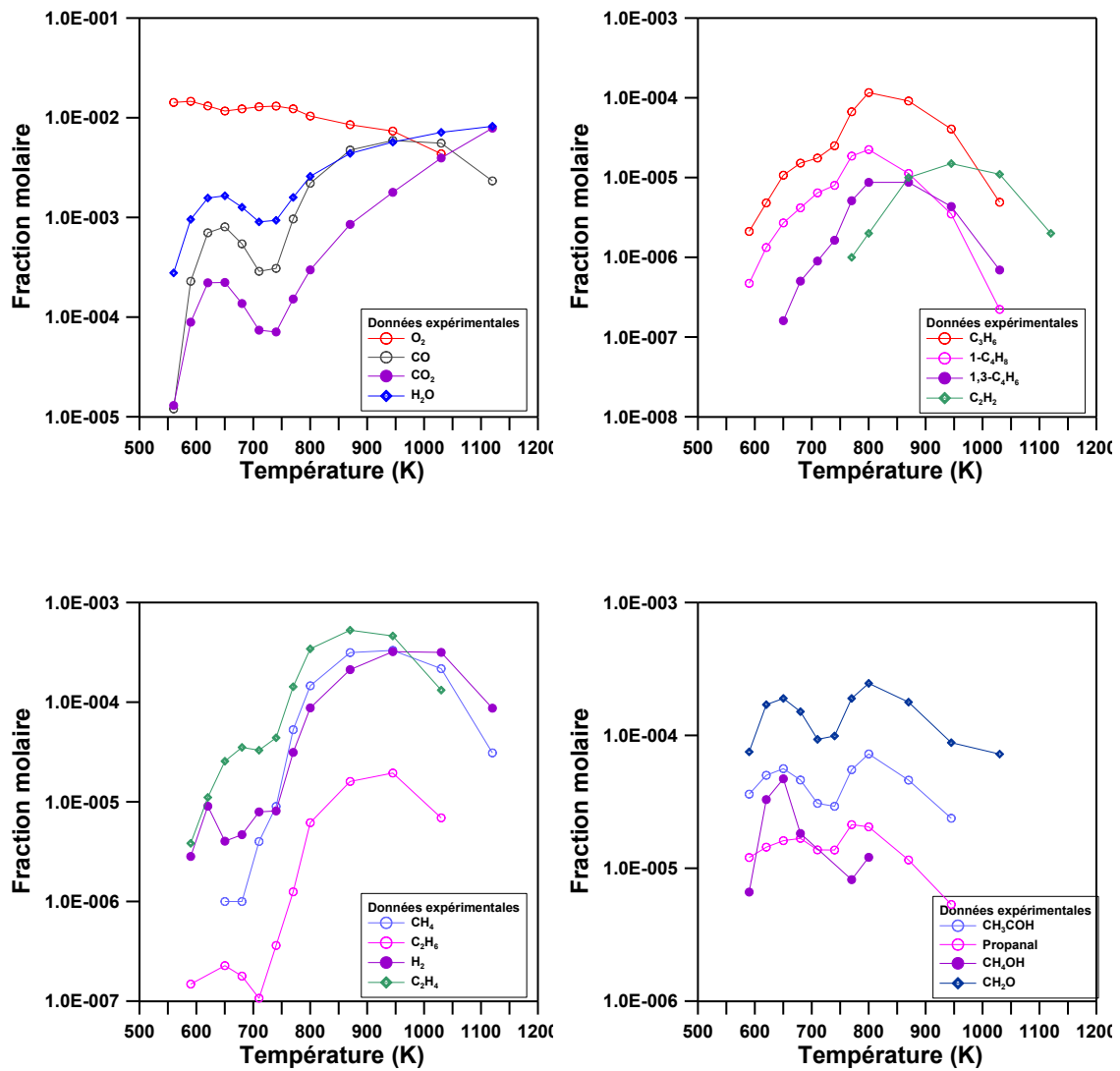


Figure 37. Oxydation du gazole réel en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=1,0$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,065\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

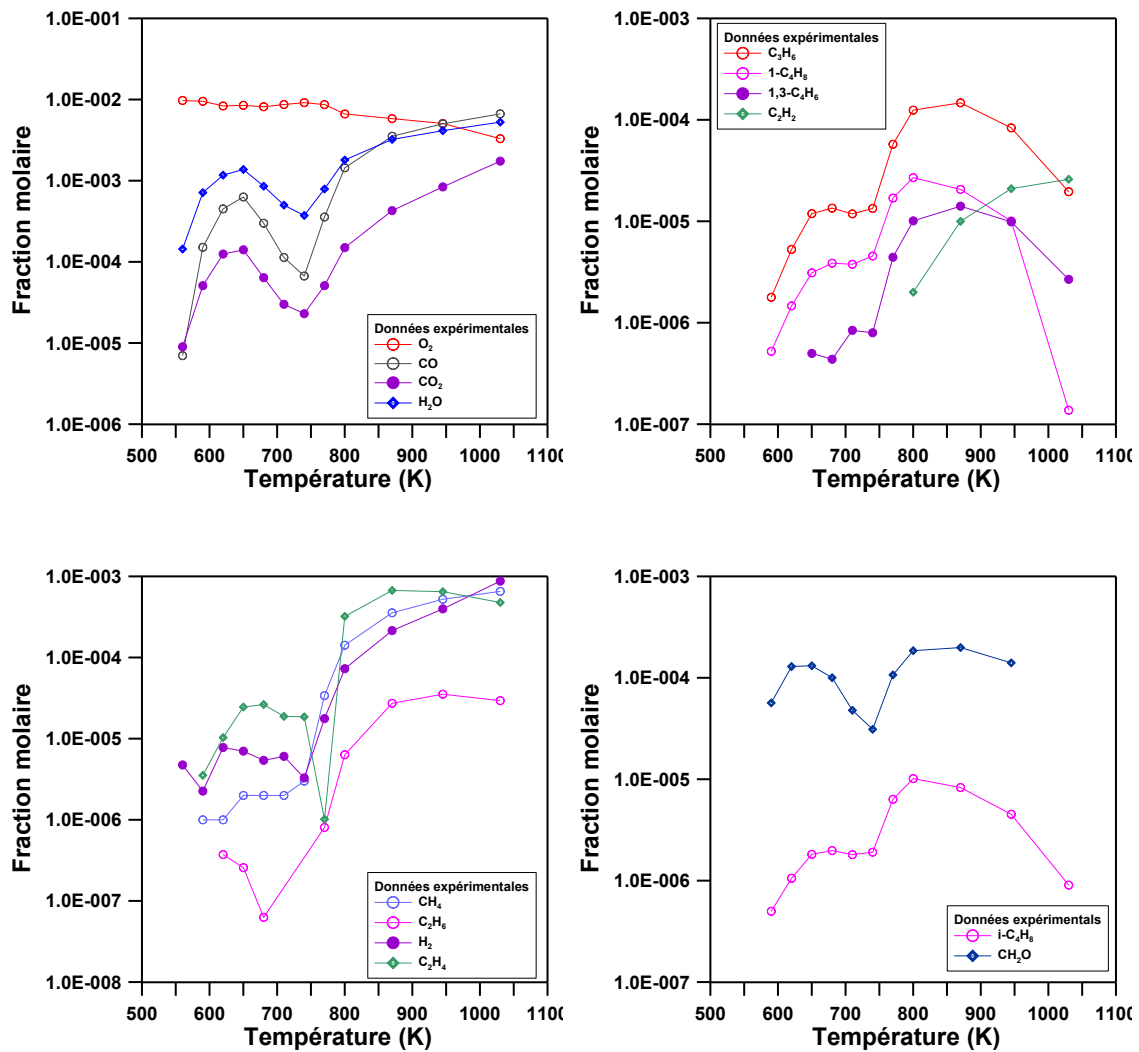


Figure 38. Oxydation du gazole réel en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=1,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC} = 0,065\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

### 3.3.2 Oxydation du B30 réel

#### a) Conditions expérimentales

Les expériences d'oxydation du B30 réel avec faible teneur en soufre ont été réalisées à haute pression, entre 560 et 1030K, et à quatre richesses, comme l'indique le Tableau 19 ci-dessous :

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

<i>Fractions molaires (ppm)</i>				
<i>B30</i>	<i>O<sub>2</sub></i>	<i>N<sub>2</sub></i>	<i>φ</i>	<i>P (bar)</i>
600	0,0574	0,9420	0,25	10
600	0,0287	0,9707	0,5	10
600	0,0144	0,9850	1	10
600	0,0096	0,9898	1,5	10

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

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

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

### b) Résultats expérimentaux

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

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

Dans ce cas, parmi les espèces intermédiaires détectées, CO, le méthane, l'éthylène, le propène et le formaldéhyde sont majoritaires. Comme pour le gazole conventionnel, les espèces identifiées et mesurées correspondent aux espèces inférieures à C<sub>5</sub>. Les profils de concentration des espèces intermédiaires évoluent également en forme de cloche et présentent une zone de NTC et un maximum entre 800 et 900K.

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

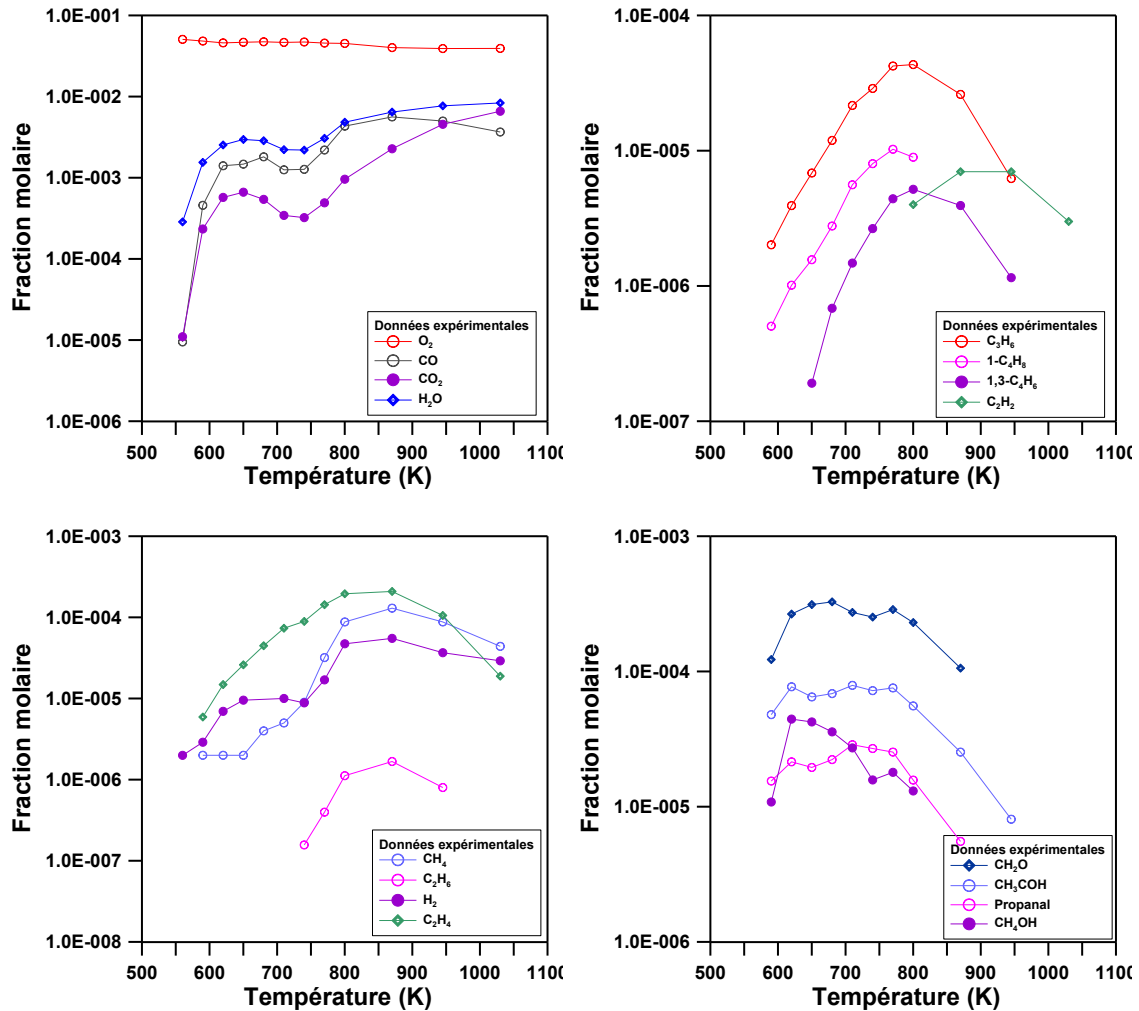


Figure 39. Oxidation du B30 réel en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=0,25$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}= 0,06\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

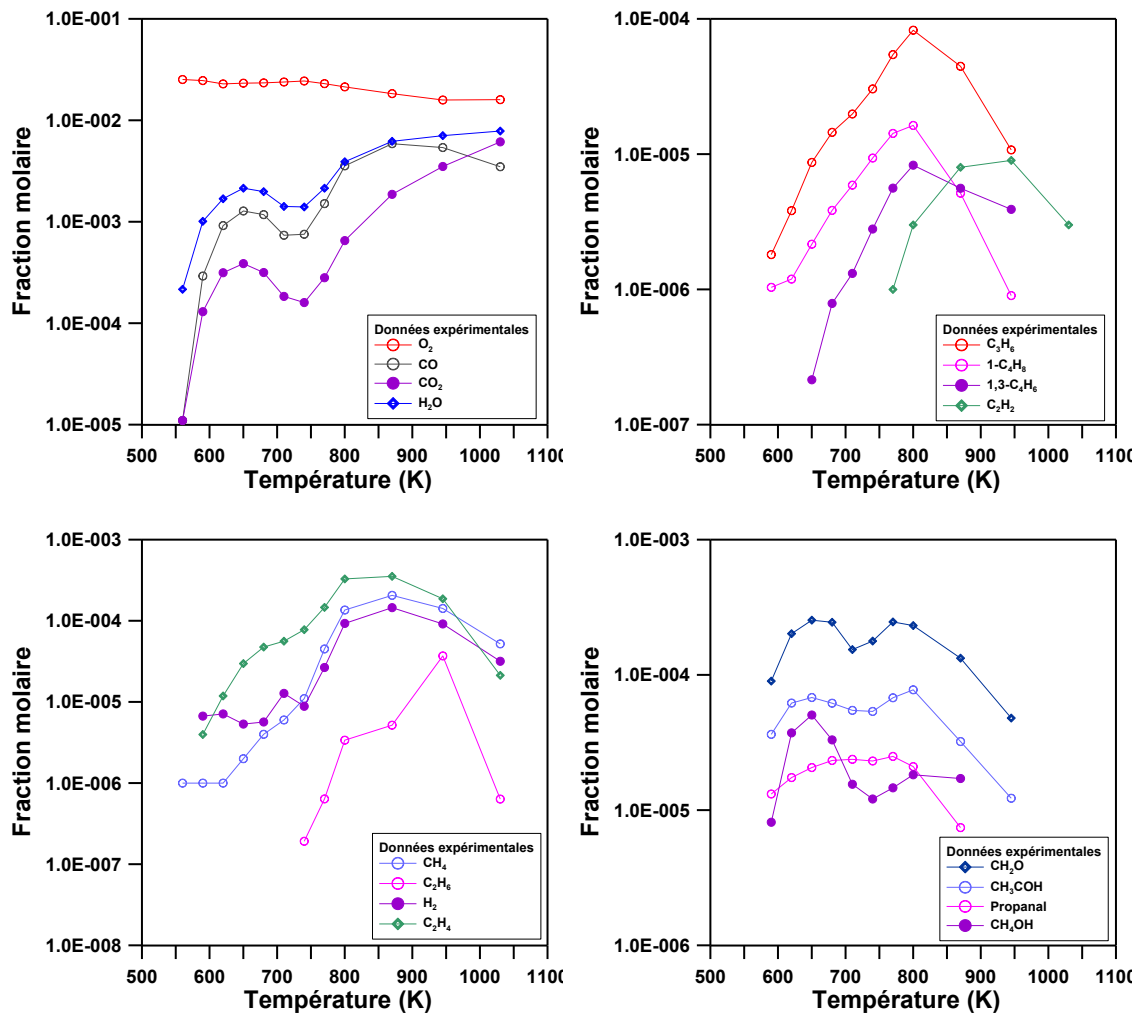


Figure 40. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ;  $\phi=0,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}= 0,06\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

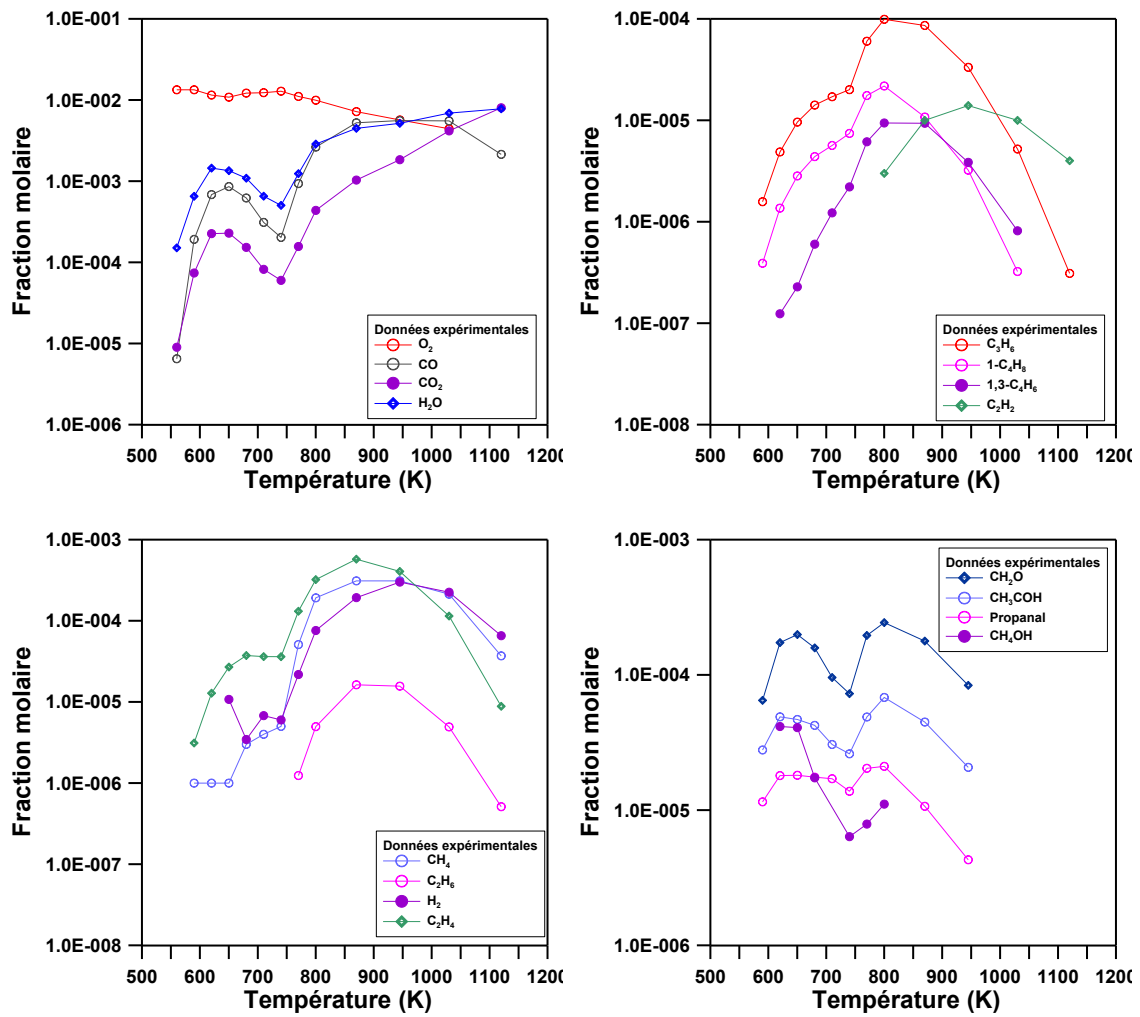


Figure 41. Oxydation du B30 réel en JSR : P=10 bar ;  $\phi=1,0$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}= 0,06\%$



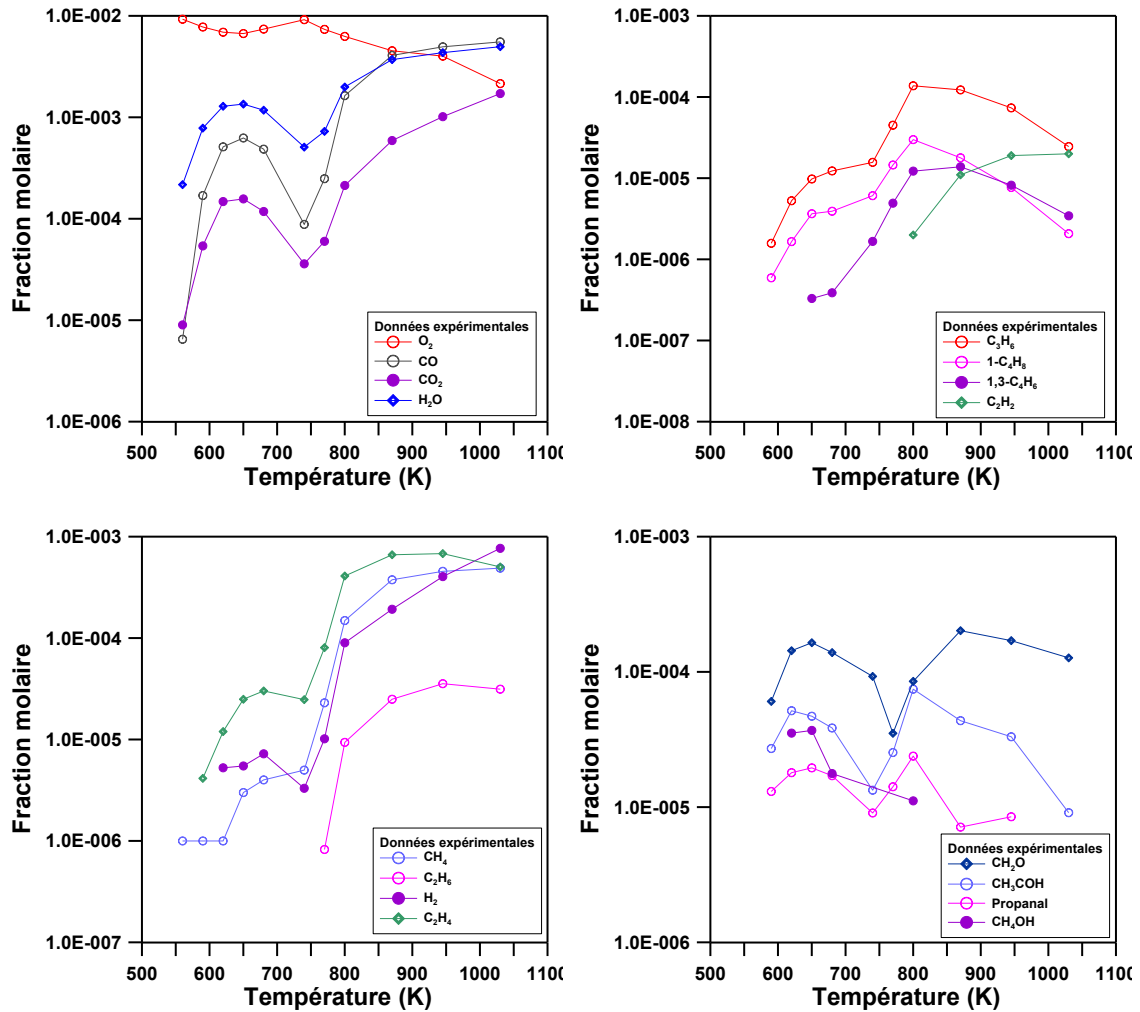


Figure 42. Oxydation du B30 réel en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=1,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}= 0,06\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

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

#### a) Conditions expérimentales

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

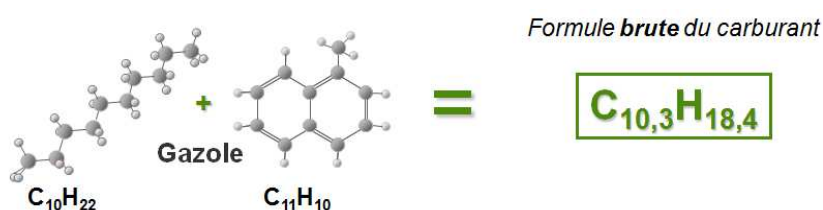


Figure 43. Composition du carburant modèle type gazole ou IDEA-fuel : 70%<sub>mol</sub> de *n*-décane et 30%<sub>mol</sub> de 1-méthylnaphtalène.

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

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

Fractions molaires (ppm)					
<i>n</i> -décane	1-Méthylnaphtalène	O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	φ	P (bar)
700	300	0,0596	0,9394	0,25	10
700	300	0,0298	0,9692	0,5	6 et 10
700	300	0,0149	0,9841	1	6 et 10
700	300	0,0099	0,9891	1,5	10

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

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

<i>Propriétés</i>	<i>Gazole modèle</i>
	C <sub>10,3</sub> H <sub>18,4</sub>
H/C	1,8
M.V. (kg/m <sup>3</sup> )	798
PCI (MJ/kg)	≤ 44,240*
Indice de cétane	55
Point éclair (55min)	≥ 60°C*
Aromatiques Totaux	30% Mole
S (ppm)	≈ 0

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

### b) Résultats expérimentaux

Dans cet intervalle de températures, les trois régimes d'oxydation peuvent être observés pour les deux pressions de travail (6 et 10 bar) : la flamme froide entre 560 et 700K, le coefficient négatif de température entre 700 et 900K, et le régime d'oxydation de haute température à  $T > 900\text{K}$ . Ces résultats sont représentés sur la Figure 44 (richesse 0,25), la Figure 45 (richesse 0,5), la Figure 46 (richesse 1) et la Figure 47 (richesse 1,5), à une pression de 10 bar, et sur la Figure 48 (richesse 0,5) et la Figure 49 (richesse 1) à une pression de 6 bar.

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

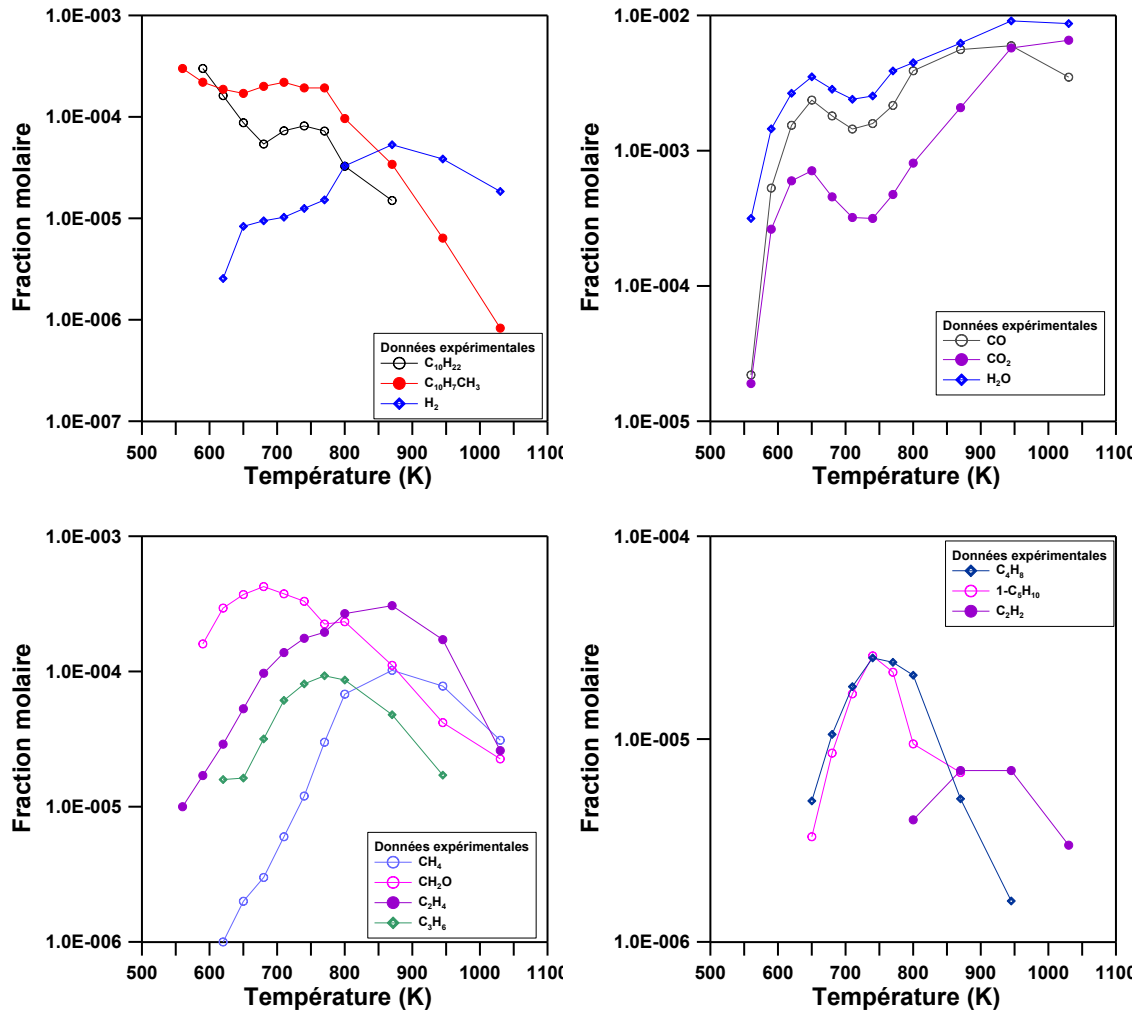


Figure 44. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=0,25$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

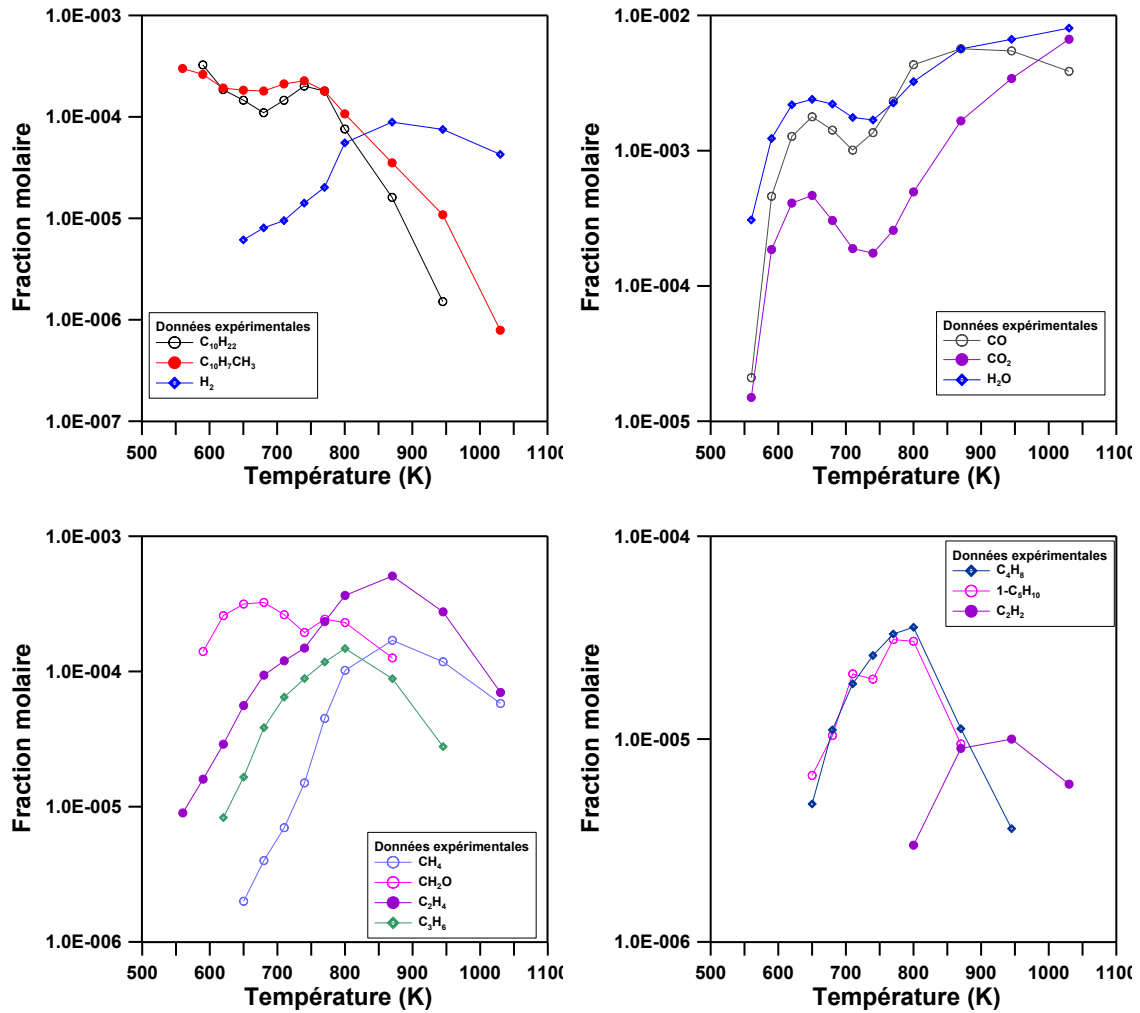


Figure 45. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=0,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

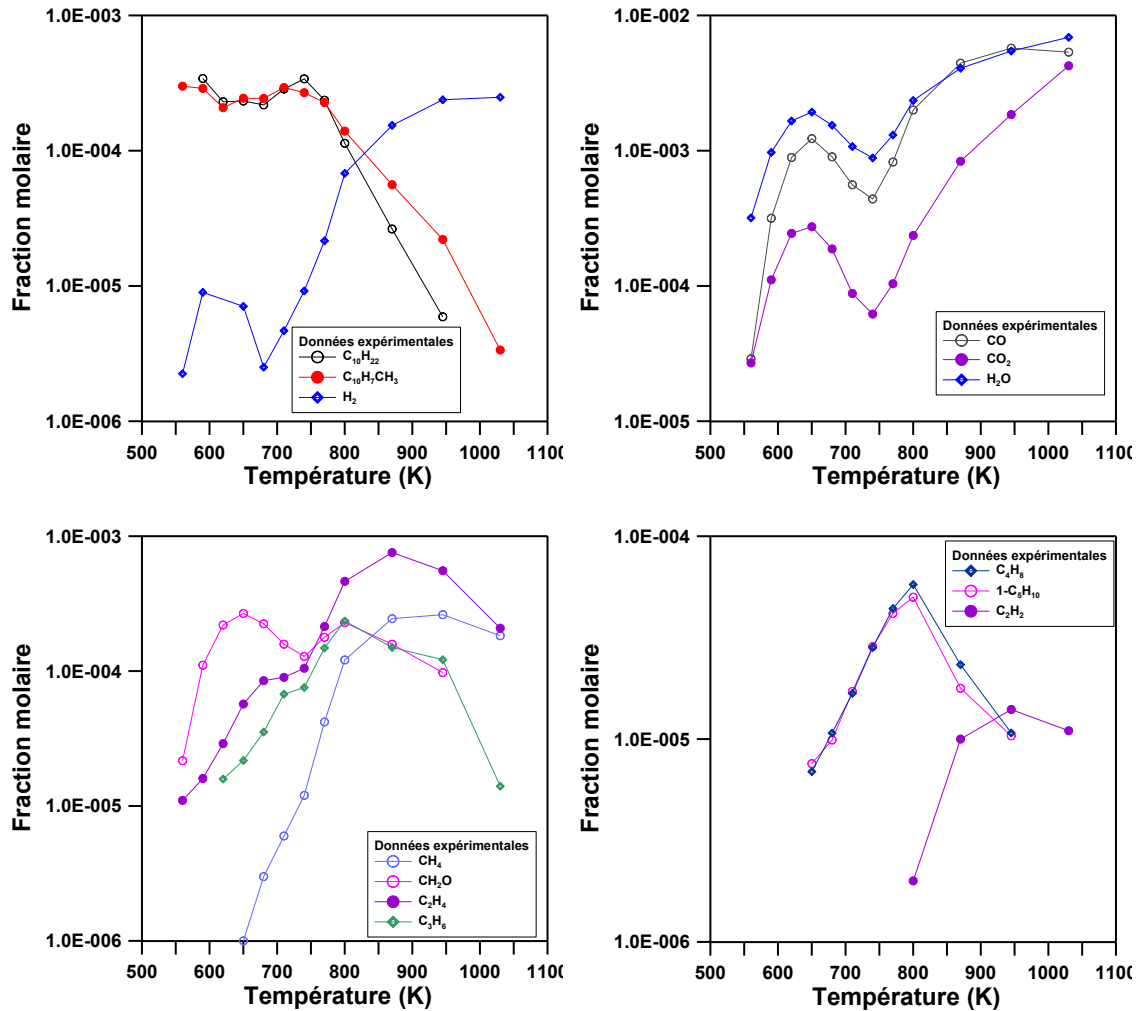


Figure 46. . Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=1,0$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

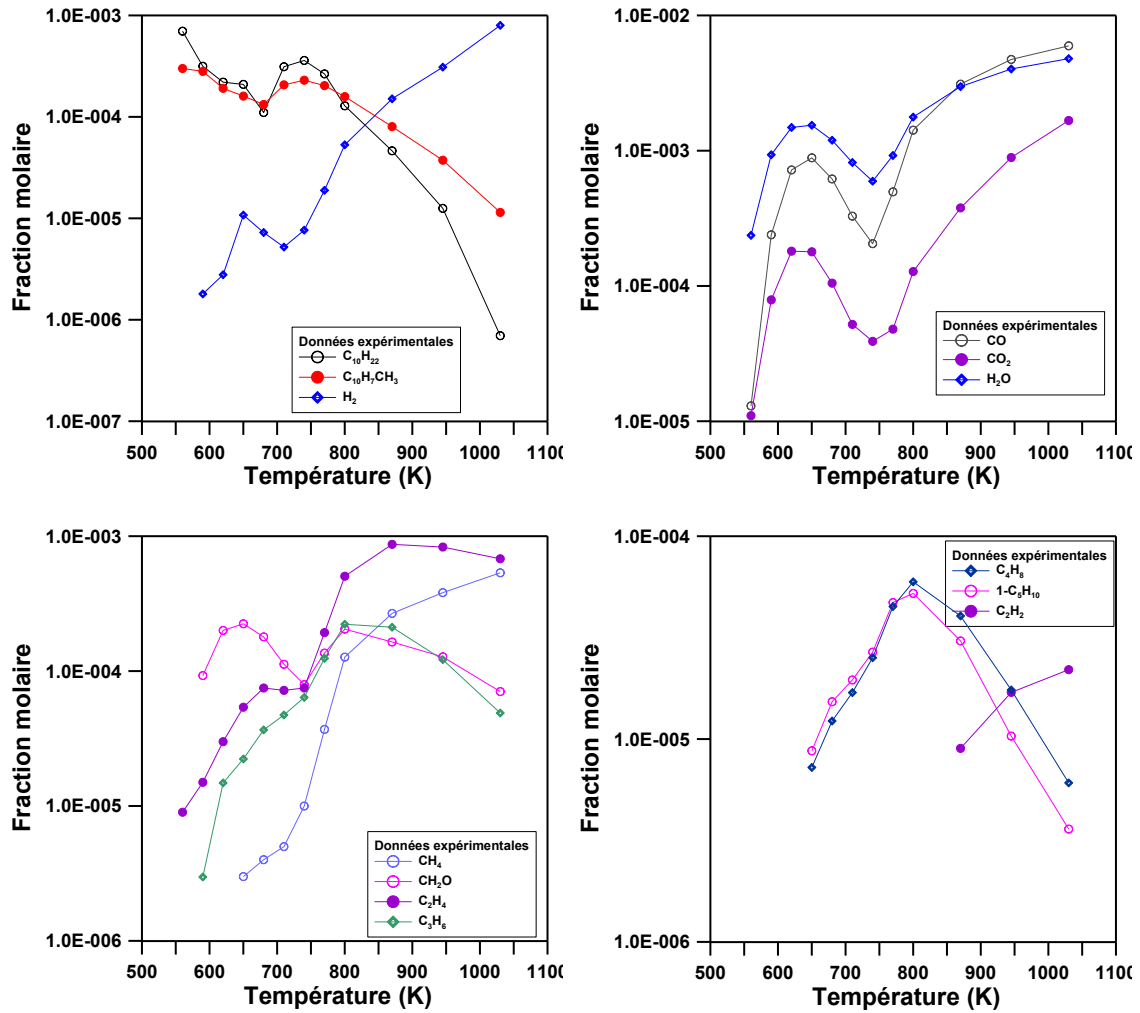


Figure 47. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=1,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$

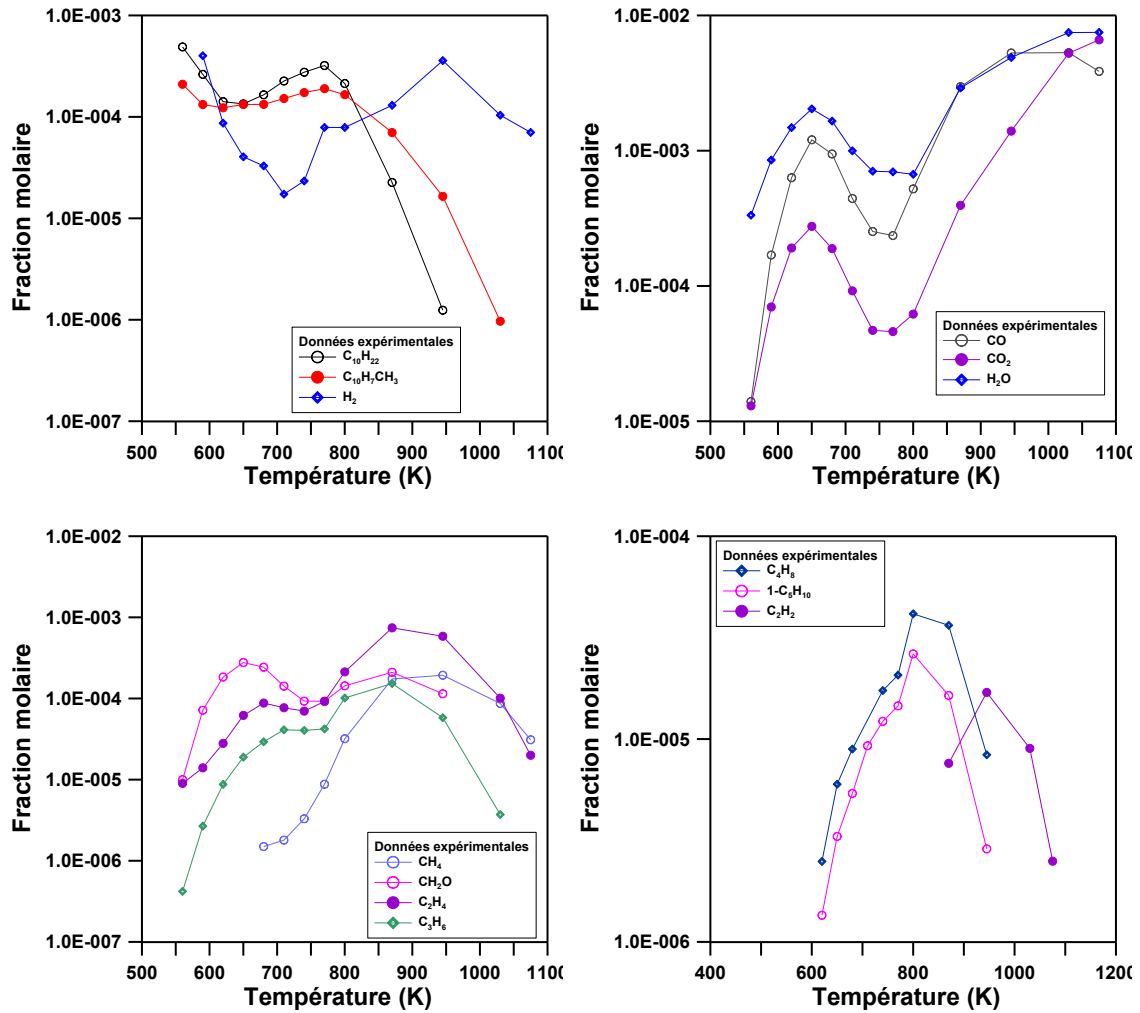


Figure 48. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR :  $P=6$  bar ;  $\phi=0,5$  ;  $\tau=0.6s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .



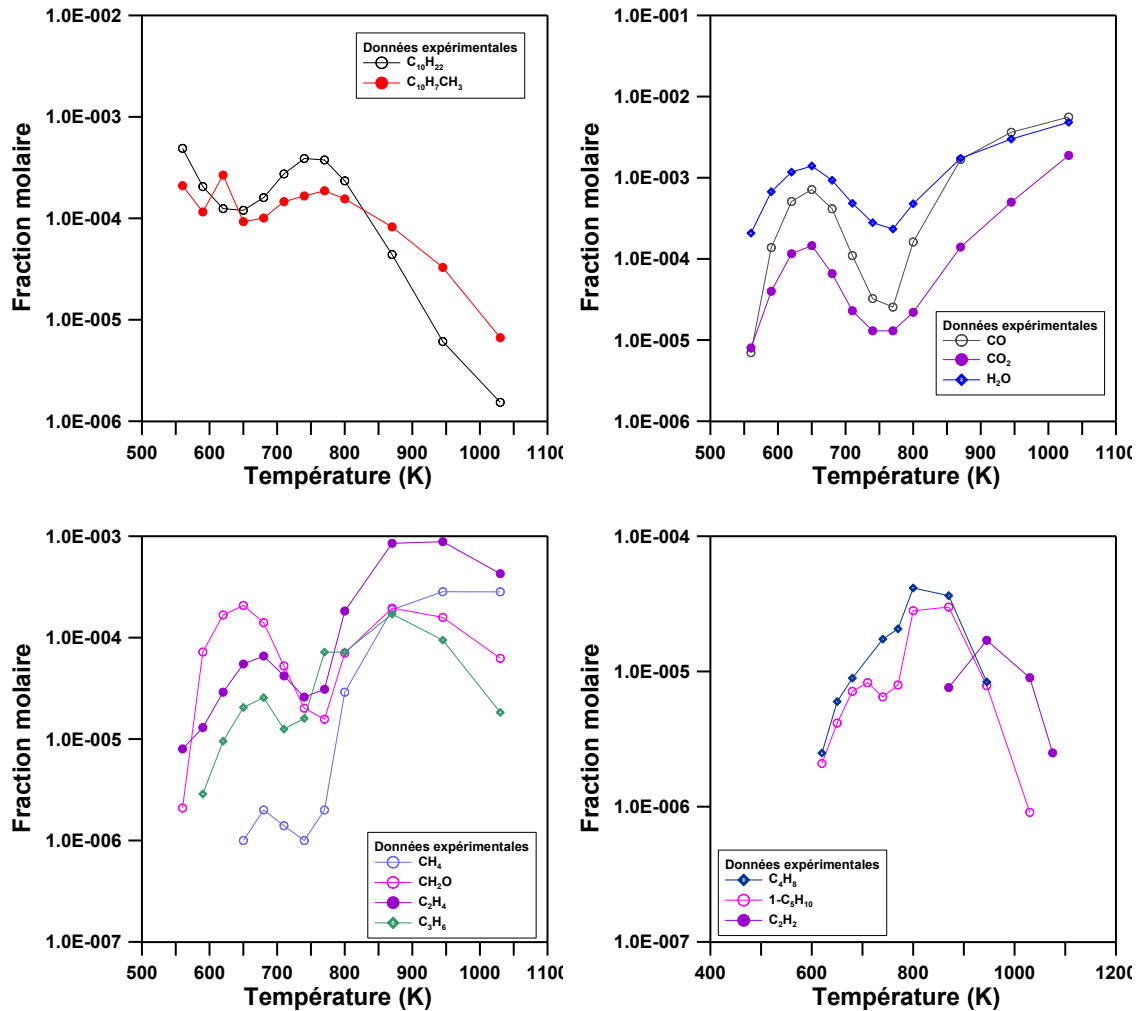


Figure 49. Oxydation du carburant modèle type gazole en JSR :  $P=6$  bar ;  $\phi=1,0$  ;  $\tau=0.6s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

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

#### a) Conditions expérimentales

Dans cette section, l'oxydation du carburant modèle de type B30 composé de 49%<sub>mol</sub> de *n*-décane (CAS 124-18-5, pureté > 99%, Aldrich), de 21 %<sub>mol</sub> de 1-méthyl-naphtalène (CAS 90-12-0, pureté > 95 %, Aldrich) et de 30%<sub>mol</sub> d'octanoate de méthyle (CAS 111-11-5, pureté >99%) a été menée. Ce carburant a pour formule brute  $C_{9,91}H_{18,28}O_{0,6}$ .

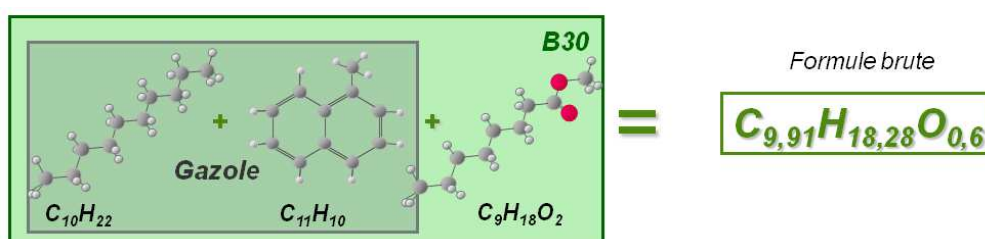


Figure 50. Composition du carburant modèle type B30 : 49%<sub>mol</sub> de *n*-décane, 21%<sub>mol</sub> de 1-méthyl-naphtalène et 30%<sub>mol</sub> d'octanoate de méthyle.

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

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

<i>Fractions molaires (ppm)</i>							
<i>n</i> -décane	1-Méthyl-naphtalène	Octanoate de méthyle	$O_2$	$N_2$	$\phi$	$P$ (bar)	
490	210	300	0,0567	0,9423	0,25	10	
490	210	300	0,0284	0,9706	0,5	6 et 10	
490	210	300	0,0142	0,9848	1	6 et 10	
490	210	300	0,0095	0,9895	1,5	10	

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

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

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

b) *Résultats expérimentaux*

Les expériences ont été réalisées pour plusieurs richesses comme dans les cas précédent. Les résultats sont présentés sur la Figure 51 ( $\varphi = 0,25$ ), la Figure 52 ( $\varphi = 0,5$ ), la Figure 53 ( $\varphi = 1$ ) et la Figure 54 ( $\varphi = 1,5$ ), à une pression de 10 bar, et sur la Figure 55 ( $\varphi = 0,5$ ) et la Figure 56 ( $\varphi = 1$ ) à une pression de 6 bar.

Comme pour le carburant modèle de type gazole, on a suivi la consommation des constituants du carburant modèle (*n*-décane, 1-méthyl-naphtalène et octanoate de méthyle) pour toutes les richesses et toutes les pressions (6 et 10 bar). Plus de 20 espèces ont été identifiées et mesurées par FTIR, CG-MS/FID/TCD. Les profils de concentrations ont été obtenus pour H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, 1-C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>, 1,3-C<sub>4</sub>H<sub>6</sub> et 1-C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>. D'autres espèces mineures détectées à des niveaux de l'ordre du ppm n'ont pas été quantifiées.

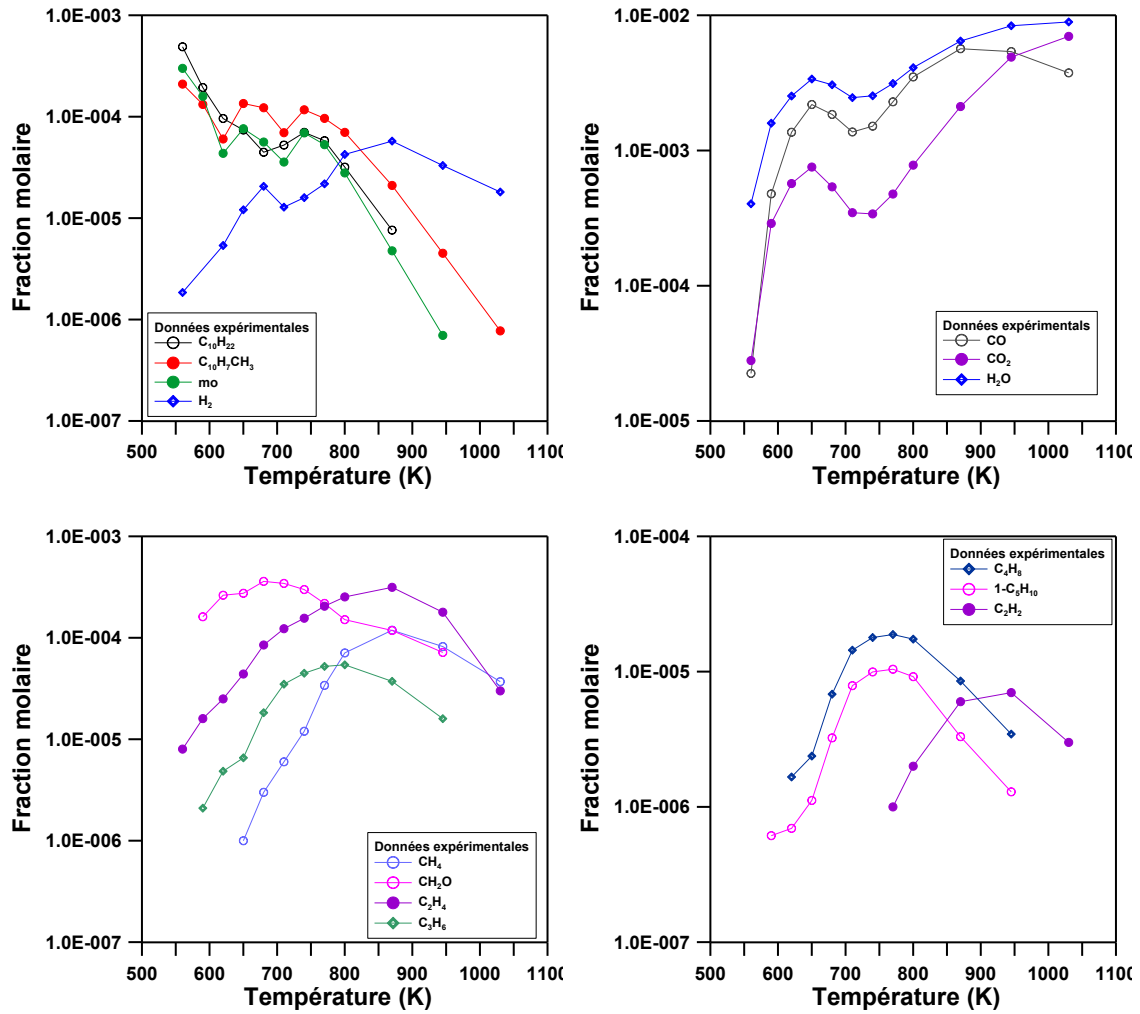


Figure 51. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=0,25$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

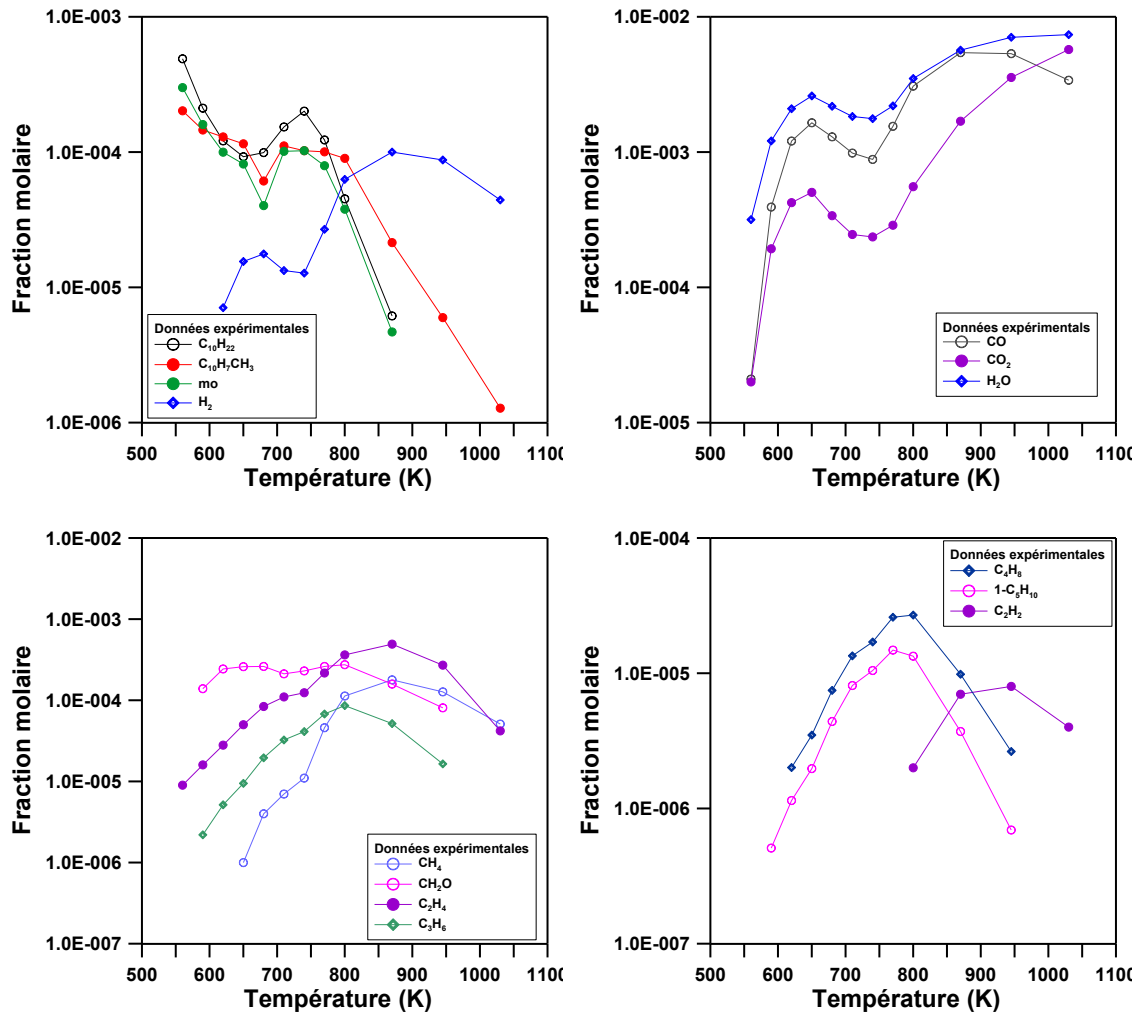


Figure 52. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=0,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

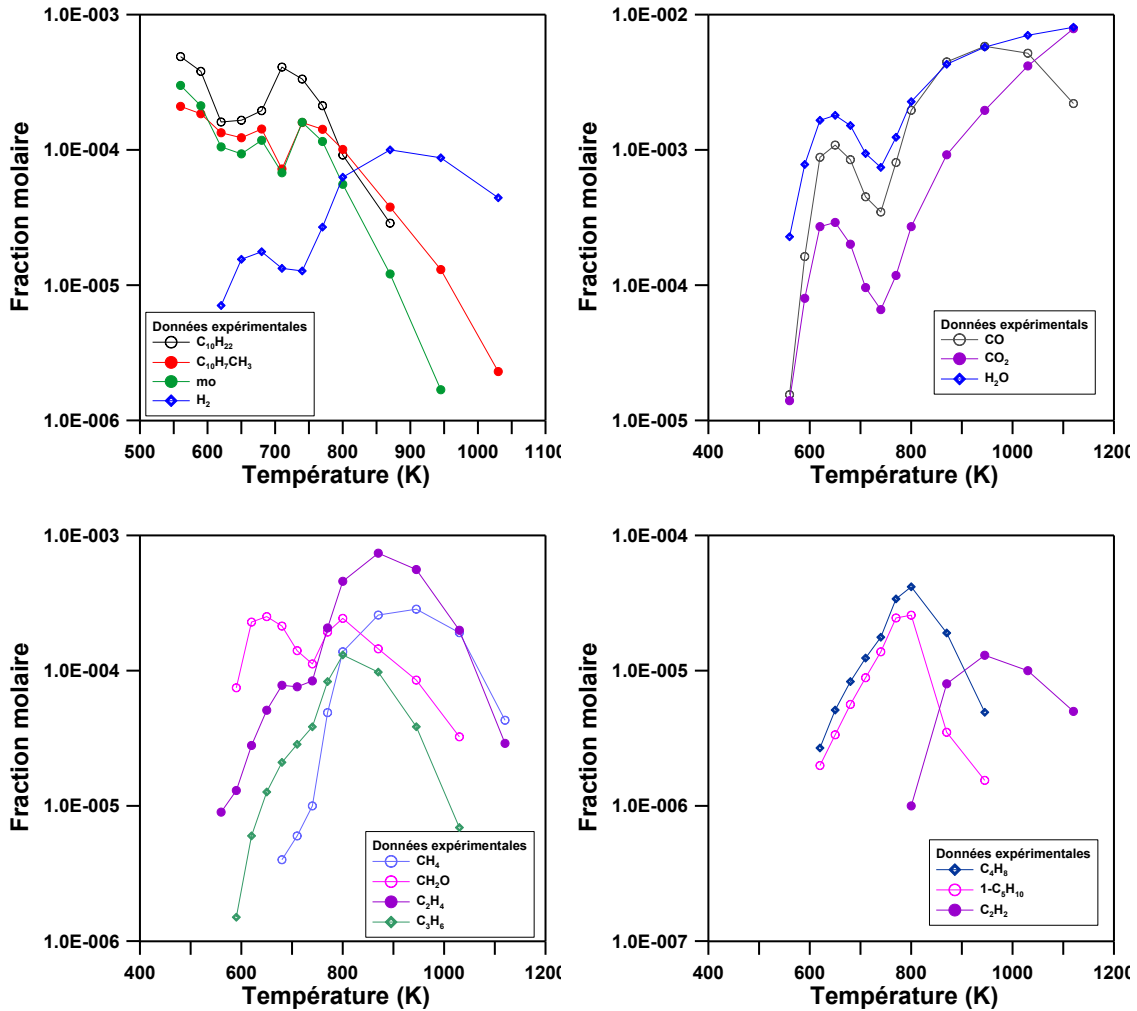


Figure 53. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=1,0$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

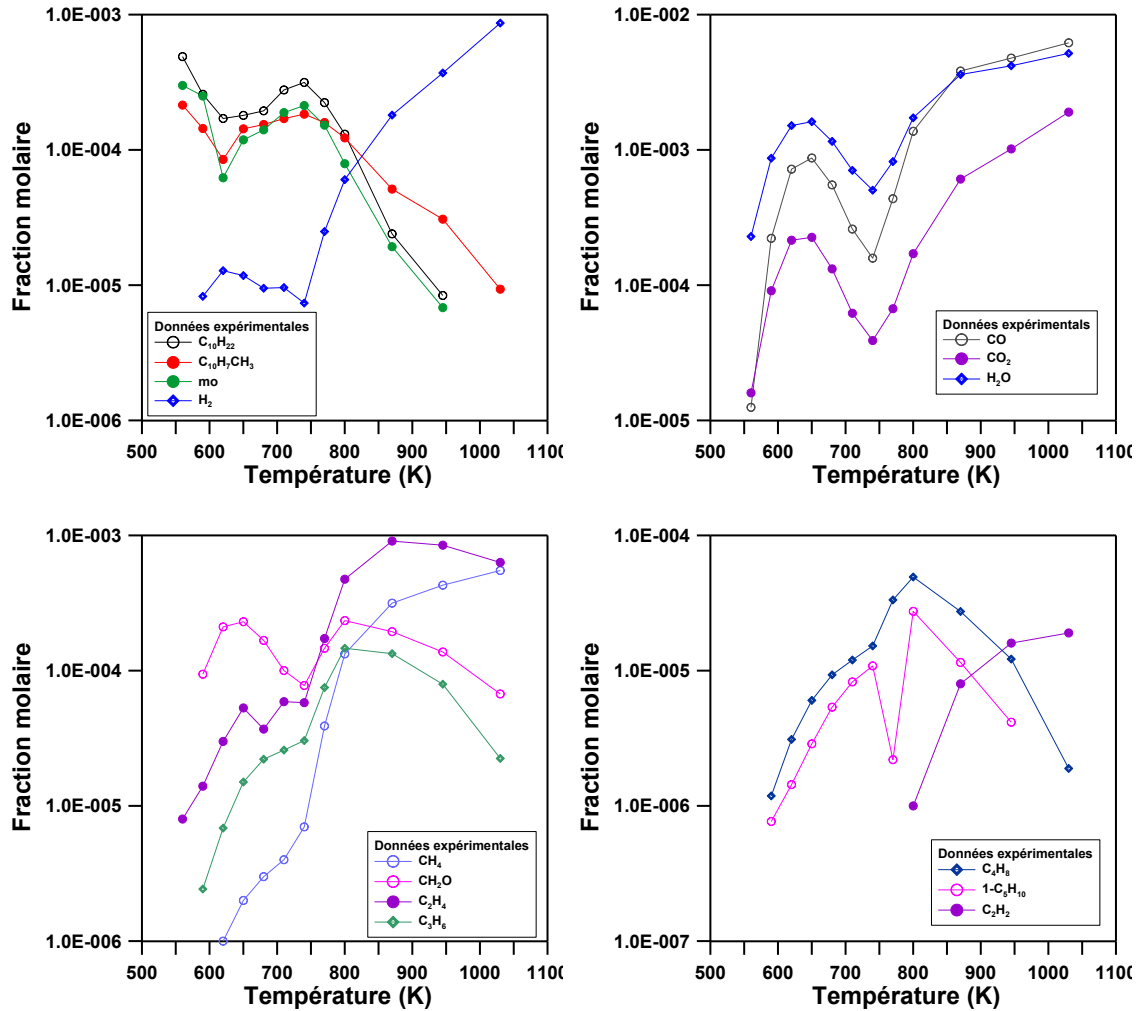


Figure 54. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR :  $P=10$  bar ;  $\phi=1,5$  ;  $\tau=1s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

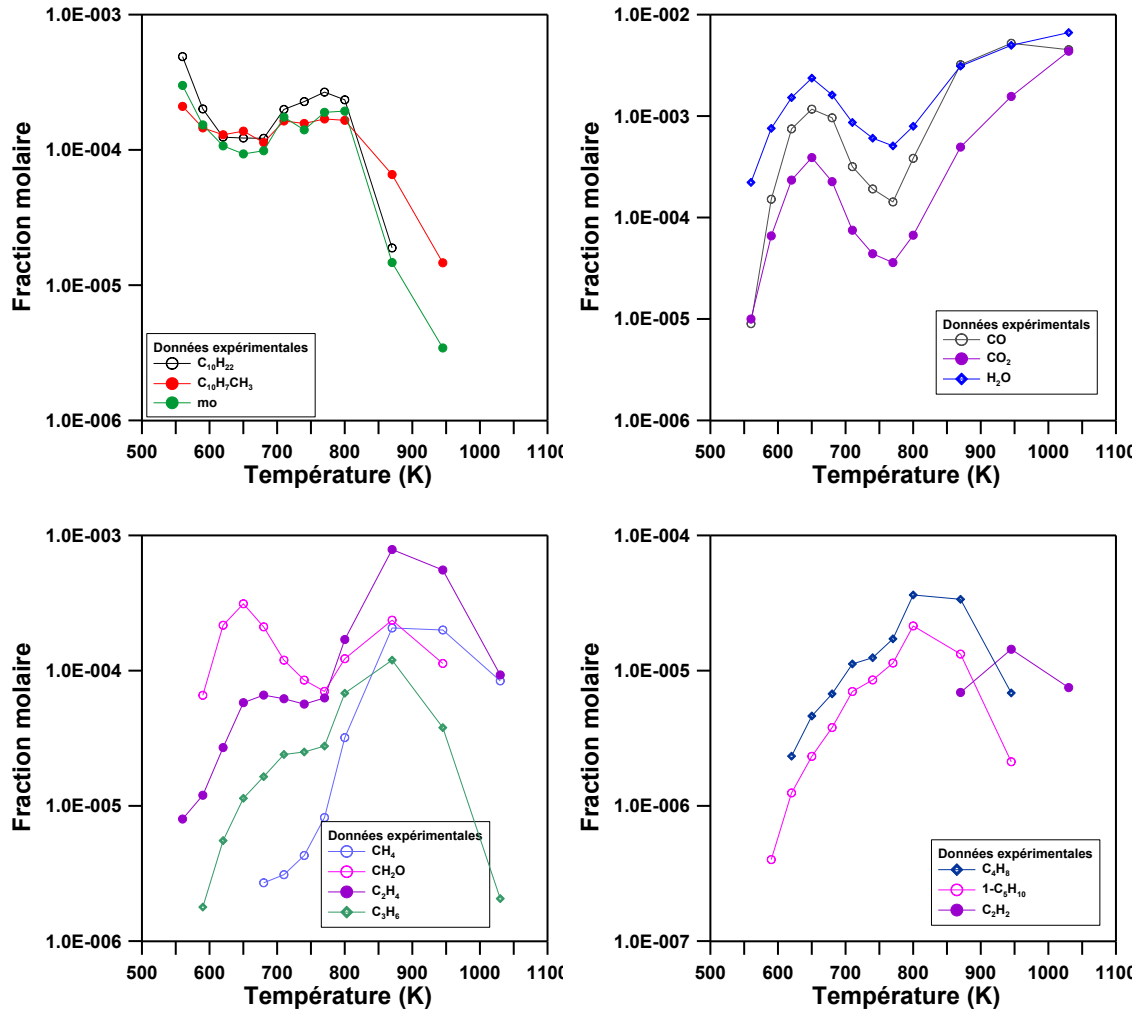


Figure 55. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR :  $P=6$  bar ;  $\phi=0,5$  ;  $\tau=0,6s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .



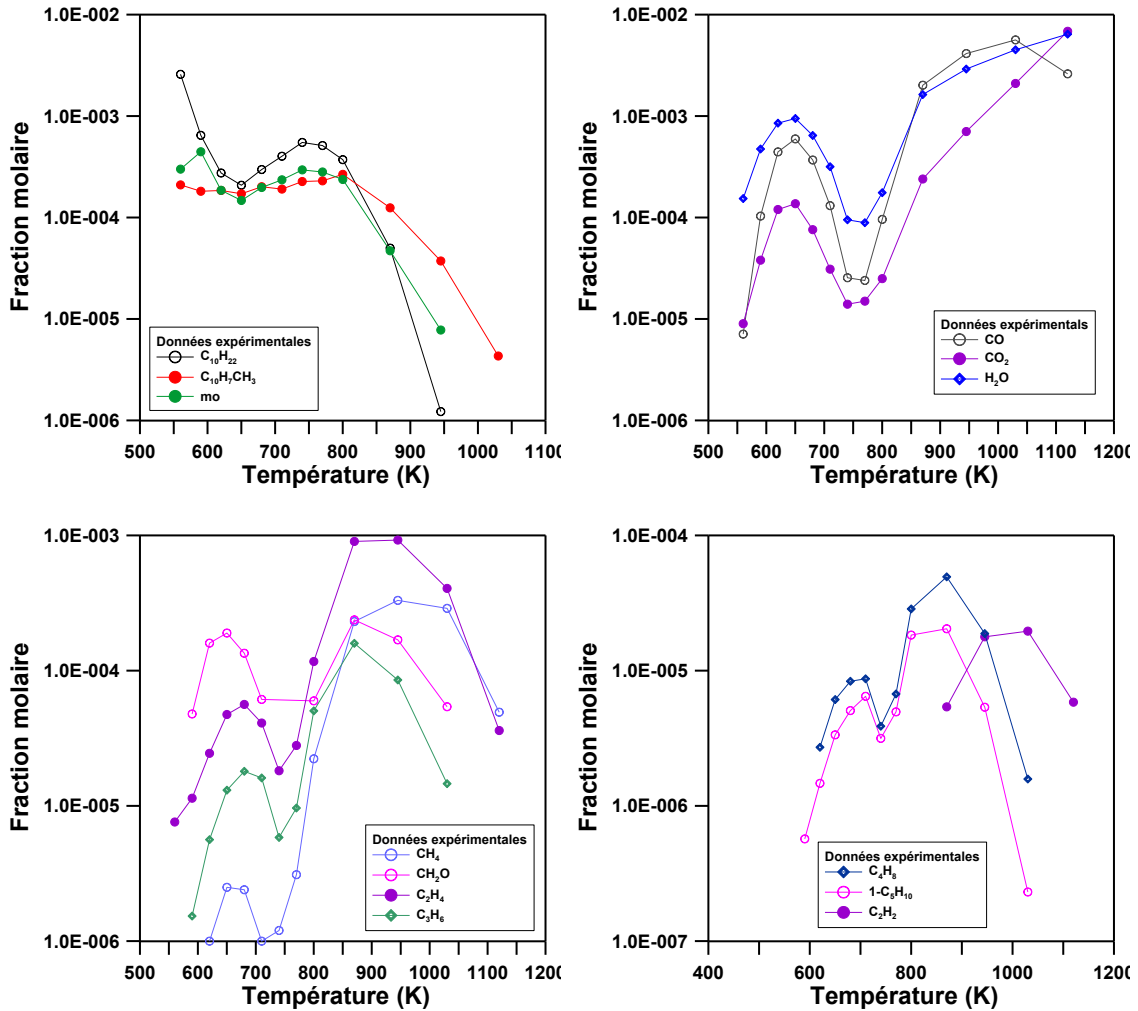


Figure 56. Oxydation du carburant modèle type B30 en JSR :  $P=6$  bar ;  $\phi=1,0$  ;  $\tau=0,6s$  ;  $X_{HC}=0,1\%$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

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

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

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

Comme on peut l'observer sur ces figures, les profils de fractions molaires obtenus pour le CO, le CO<sub>2</sub>, le H<sub>2</sub>O et l'O<sub>2</sub> lors de l'oxydation de ces deux carburants– réel et modèle– sont très similaires sur toute la gamme de conditions expérimentales.

Les profils de concentrations de CH<sub>4</sub> et de H<sub>2</sub> produits par l'oxydation du carburant gazole ont tendance à être plus élevés que ceux obtenus avec le carburant modèle, tandis que les profils de C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> et C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> ont montré un comportement inverse. Cette tendance est due à la teneur en *n*-alcane plus élevée dans le carburant modèle, conduisant à une formation plus importante d'éthylène et de propylène par  $\beta$ -scission.

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

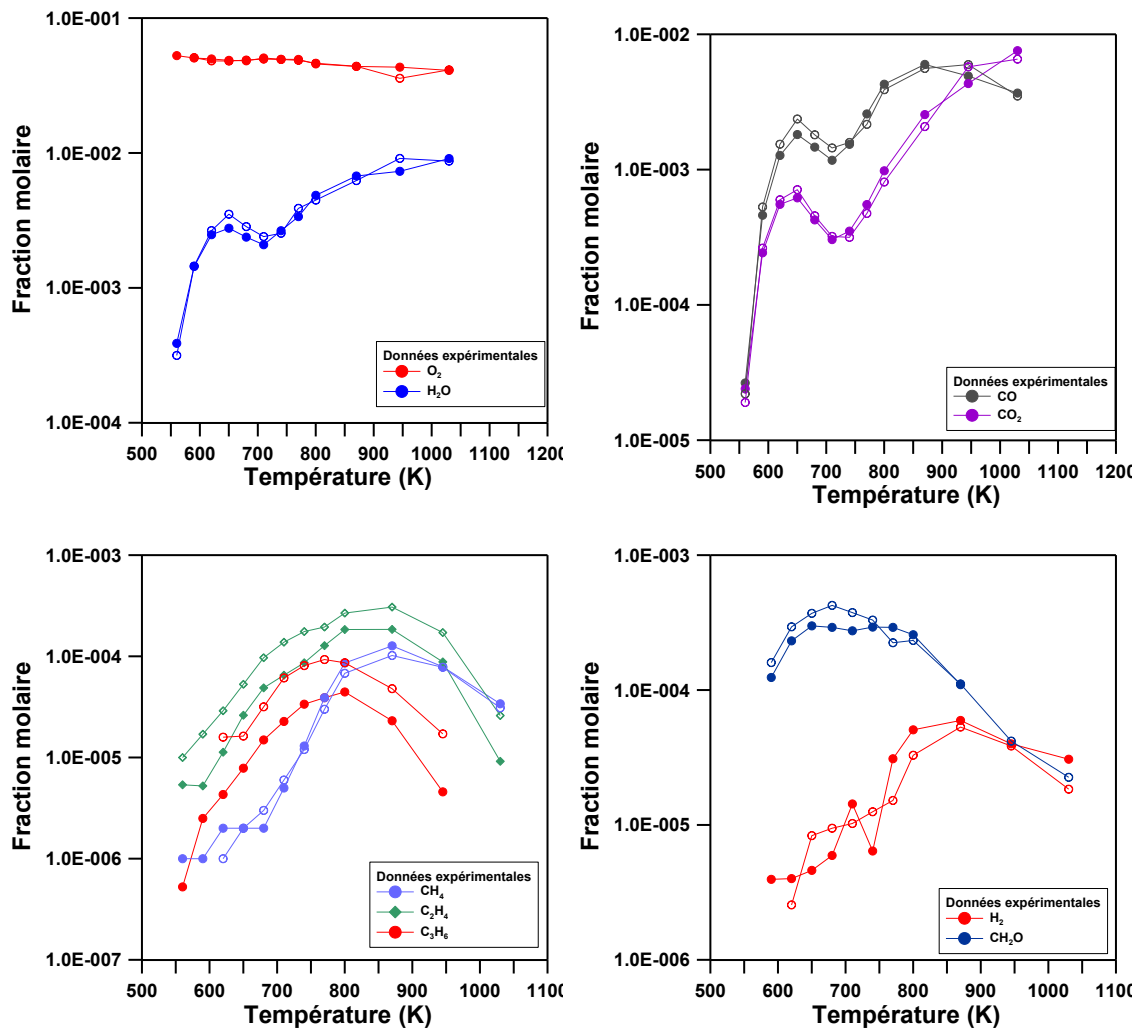


Figure 57. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) :  $\phi=0,25$ , 10 bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

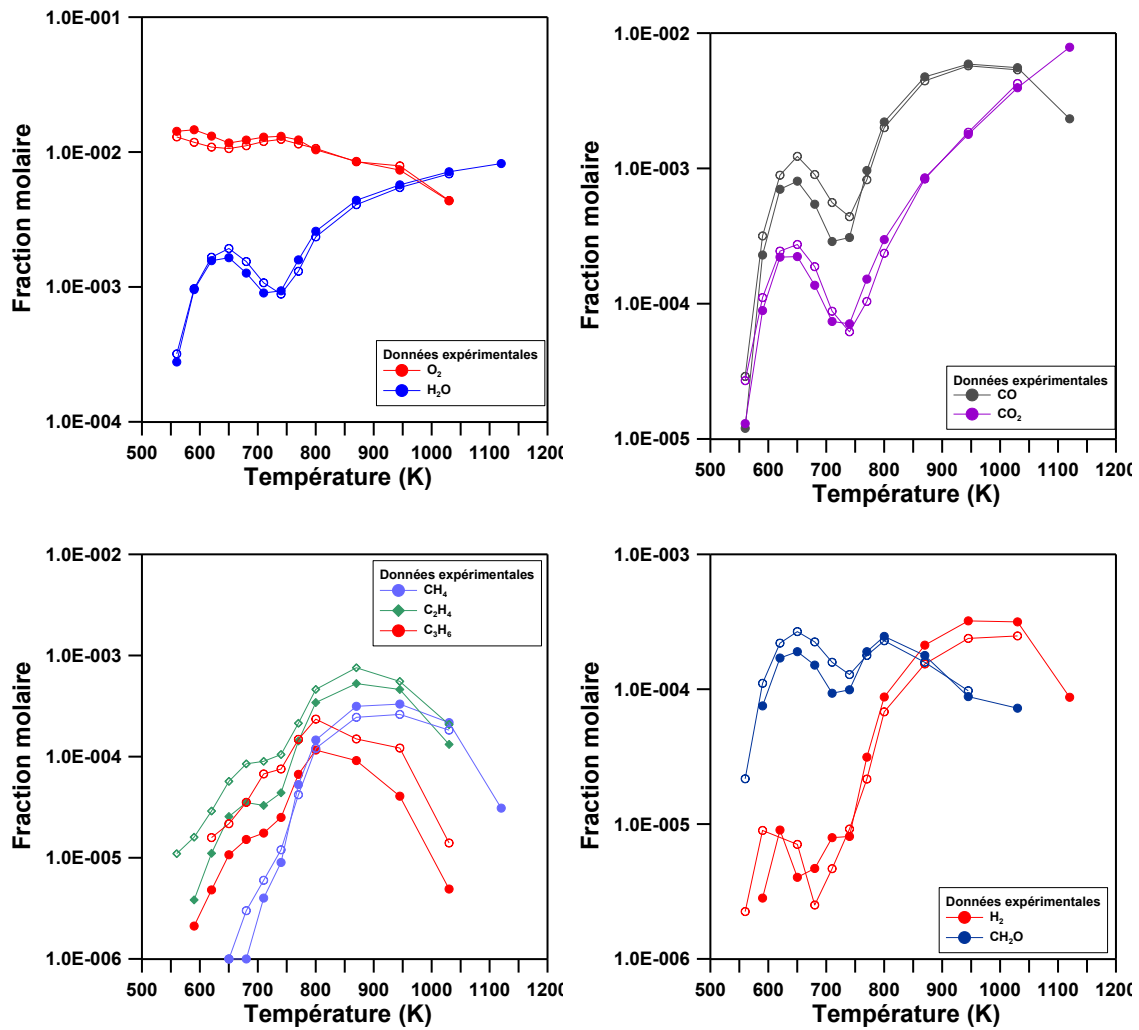


Figure 58. Comparaison de l'oxydation du gazole réel (symboles remplis) et du carburant modèle type gazole (symboles vides) :  $\phi=1$ , 10 bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

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

Les profils de fractions molaires mesurés lors de l'oxydation du B30 commercial et du B30 modèle ont été comparés dans toutes les conditions expérimentales étudiées. Comme on peut le voir sur la Figure 59 ( $\phi=0,25$ ) et la Figure 60 ( $\phi=1$ ), les profils de fractions molaires des espèces intermédiaires et produits de combustion obtenus pour CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et O<sub>2</sub>, au cours de l'oxydation des deux carburants, sont très similaires dans toute la gamme de conditions expérimentales.

Comme pour le cas du gazole, un comportement similaire a été observé lors de la comparaison des profils de concentration de C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> et C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> produits par l'oxydation du B30 réel et du B30 modèle. Ces profils se sont montrés légèrement plus élevés

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

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

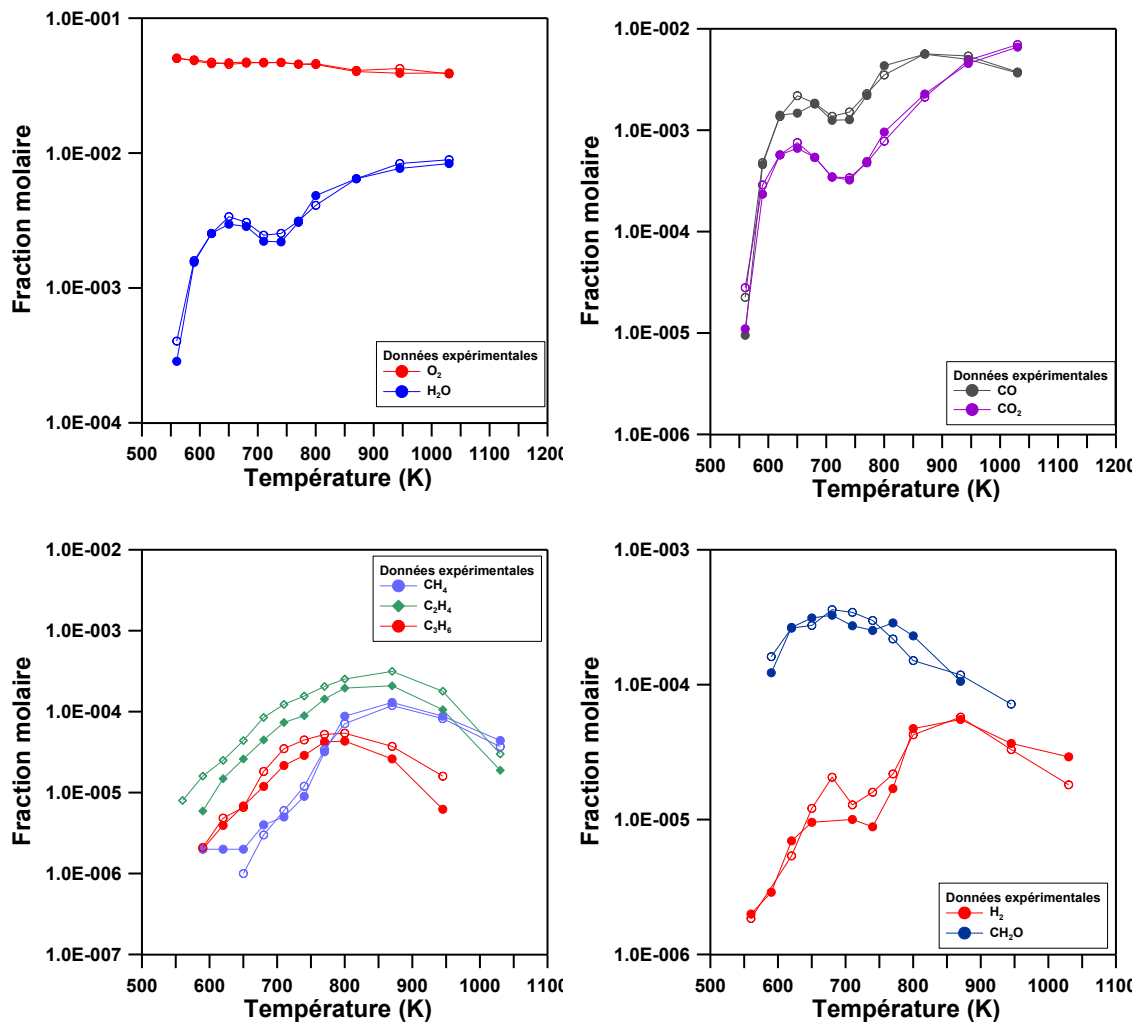


Figure 59. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) :  $\phi=0,25$ , 10 bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

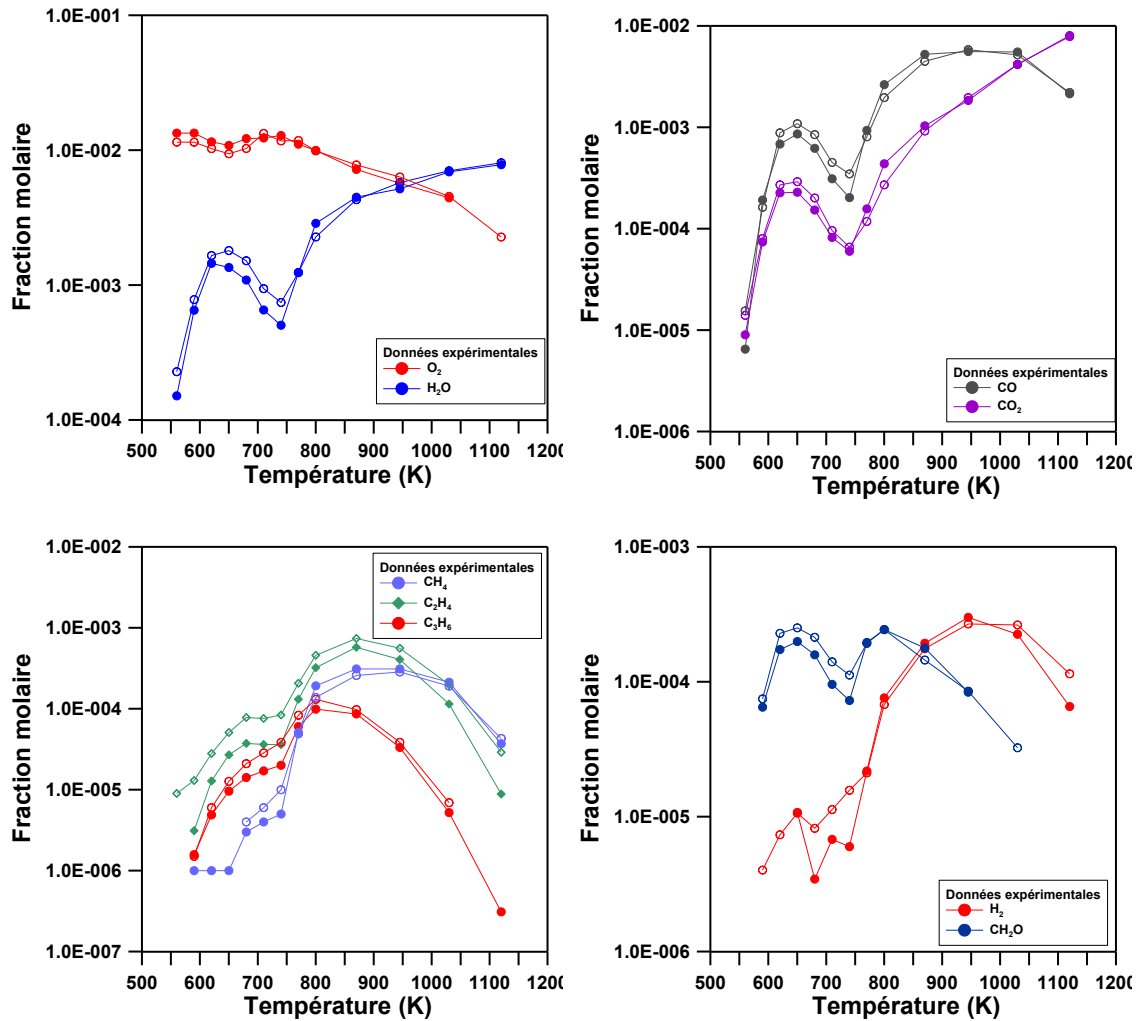


Figure 60. Comparaison de l'oxydation du B30 réel (symboles remplis) et du carburant modèle type B30 (symboles vides) :  $\phi=1$ , 10 bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

### 3.3.6 Influence de la richesse sur la réactivité de carburant.

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

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

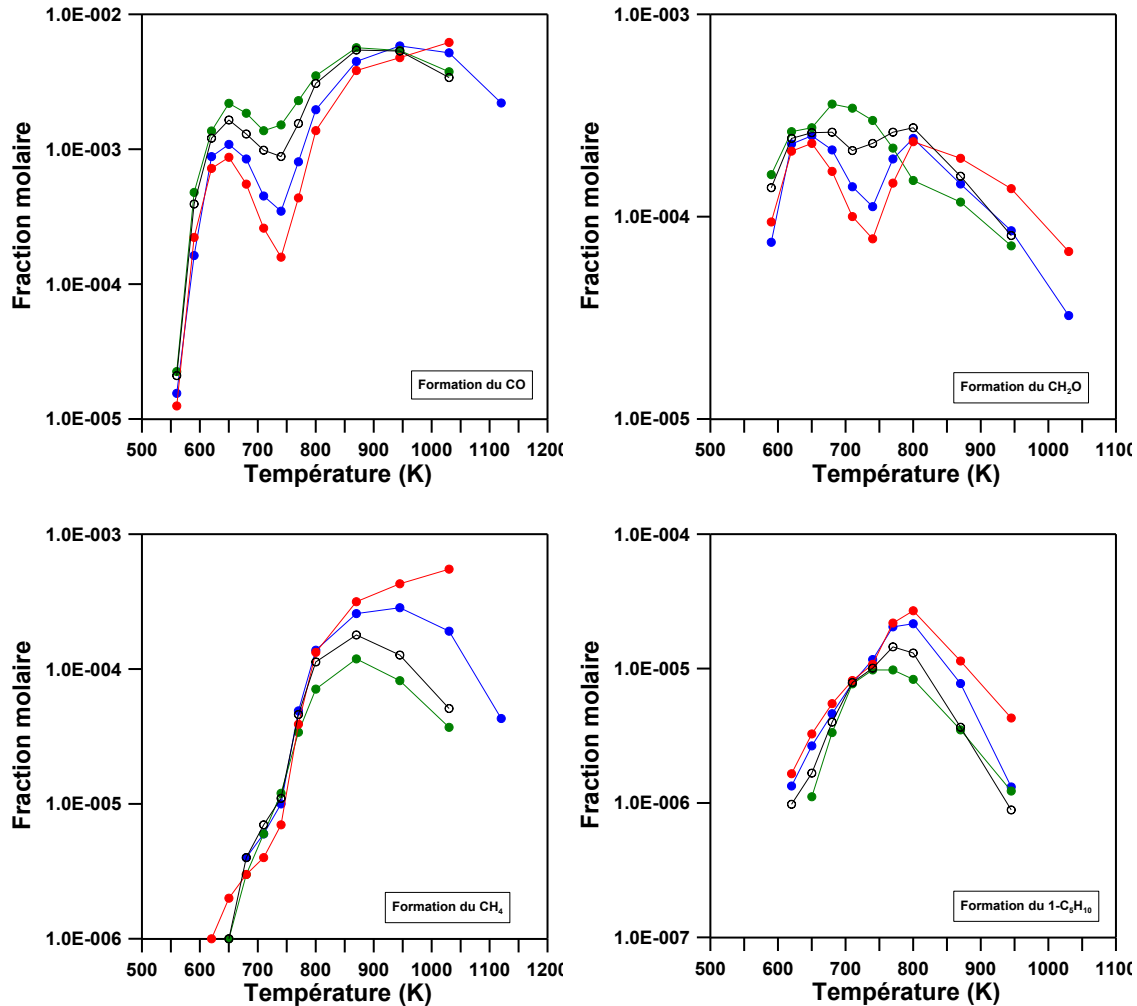


Figure 61. Influence de la richesse sur quelques espèces mesurées lors de l'oxydation en JSR du carburant modèle type B30 à 10 bar et  $\tau=1s$  pour une richesse de  $\phi=0,25$  (symboles verts),  $\phi=0,5$  (symboles noirs)  $\phi=1$  (symboles bleus) et  $\phi=1,5$  (symboles rouges). Les incertitudes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

### 3.3.7 Influence de la pression sur l'oxydation des carburants

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

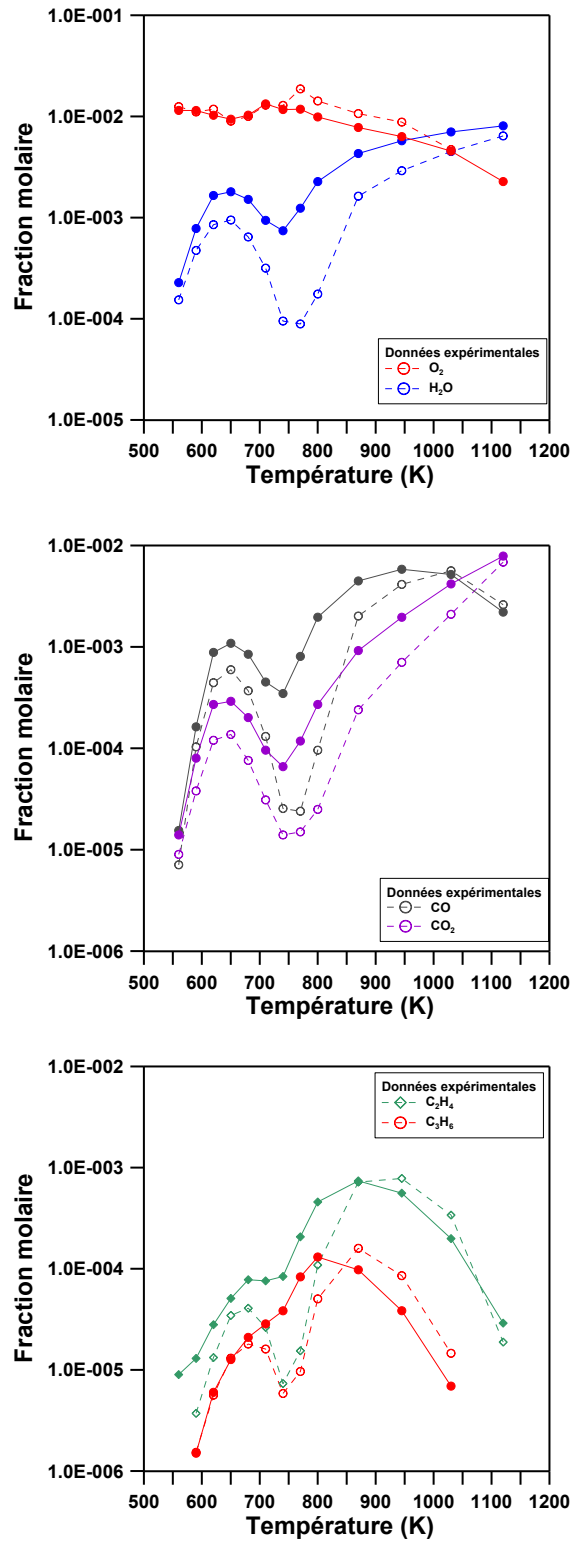


Figure 62. Influence de la pression sur quelques espèces mesurées lors de l'oxydation en JSR du carburant modèle type B30 à 10 bar (symboles remplis) et 6 bar (symboles vides) pour une richesse stœchiométrique. Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .



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

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

Le développement du mécanisme repose sur les travaux de modélisation de l'oxydation du *n*-décane réalisés par Diévert 2008 et du 1-méthyl-naphtalène réalisés par Mati *et al.* 2007. Ensuite, des réactions d'interaction entre les composants principaux du carburant et ses premiers produits d'oxydation ont été ajoutées. Elles incluent les réactions de métathèse du *n*-décane avec le radical phényle, benzyle, 1-naphtylméthyle, 1-naphtyle, et indényle. Les réactions du vinyl-naphtalène avec HO<sub>2</sub> et des radicaux décyles avec le 1-naphtaldehyde ont aussi été considérées. Par soucis de cohérence, les réactions de C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>O<sub>2</sub> avec le toluène, le 1-méthyl-naphtalène, le 1-naphtyle méthyle, le 1-naphtaldéhyde, le benzyle, le phényle, et le 1-naphtyle ont été ajoutées. Les constantes cinétiques de ces réactions sont basées sur des analogies avec des réactions similaires dans la littérature.

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

#### 3.4.1 Base C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub>

Le mécanisme détaillé d'oxydation du *n*-décane a été développé par Diévert pour modéliser l'oxydation de cet alcane en JSR à basse température. Ce mécanisme utilise les sous-modèles de Le Cong 2007 (C<sub>0</sub>-C<sub>2</sub>) –avec des modifications de constantes cinétiques issues de la littérature–, de Curran *et al.* 2002 (C<sub>3</sub>) et de Yahyaoui 2005 (C<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>) ; le sous-mécanisme d'oxydation de basse température du *n*-décane a été généré par EXGAS (Warth *et al.* 1998). Le mécanisme du *n*-décane de Diévert prédit de manière satisfaisante ses résultats expérimentaux pour le régime à basse température ainsi que pour le NTC (500-750K).

Dans le mécanisme proposé dans cette étude, la base C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub> n'a pas été modifiée pour le mécanisme *n*-décane/1-méthyl-naphtalène puisque le modèle représente bien les expériences en JSR.

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

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

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

En général ce logiciel intègre une base réactionnelle C<sub>0</sub>-C<sub>6</sub>, qui inclut aussi les sous-mécanismes d'oxydation du benzène et du toluène. Ensuite, il intègre les mécanismes primaires détaillés du réactif initial, qui incluent la décomposition des radicaux par rupture C-C et C-H, les réactions d'oxydation de métathèse, d'isomérisation, de peroxydation, entre autres. Et enfin, un mécanisme secondaire pour la dégradation des produits primaires formés lors de l'étape précédente. Les propriétés thermodynamiques de ces nouvelles espèces issues des mécanismes primaires et secondaires ont été déterminées par les logiciels Thergas (Muller *et al.* 1995) et Kingas (Bloch-Michel 1995).

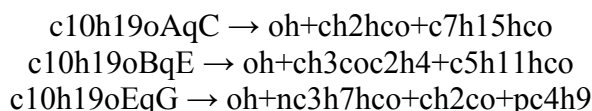
Le sous-mécanisme d'oxydation du *n*-décane a aussi été basé sur le mécanisme d'oxydation d'un gazole de Dagaut 2002 et Mati *et al.* 2007. Ce mécanisme a été validé pour un régime à haute température (entre 800 et 1400K) et inclut les mécanismes d'oxydation validés pour le *n*-propylcyclohexane et le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

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

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

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

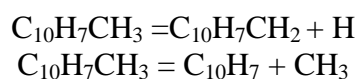
En utilisant cette nouvelle nomenclature qui fait la distinction entre les isomères, on peut écrire les voies de dégradation spécifiques à chaque isomère, comme par exemple :



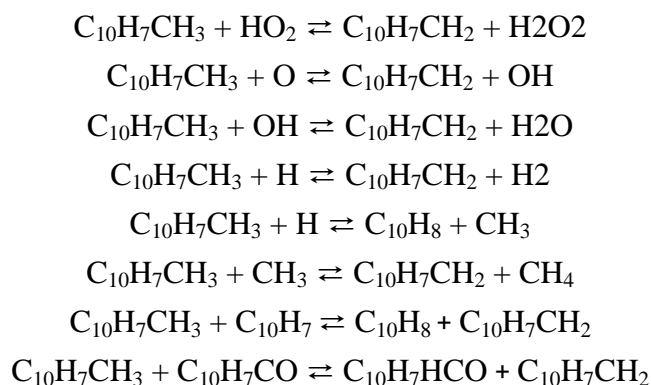
### 3.4.3 Le sous-mécanisme d'oxydation du 1-méthylnaphtalène

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

Le sous-mécanisme proposé par Mati *et al.* 2007 fait suite aux travaux de Ristori portant sur l'oxydation de composés aromatiques en JSR à 1 bar. Mati a également pris en compte les travaux de Chang *et al.* 2000 pour la rupture de la liaison C-C du groupe méthyle et les constantes cinétiques de Marinov *et al.* 1996 pour la décomposition thermique du 1-méthylnaphtalène en radical  $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2$  :



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



Les cinétiques de réaction du radical HO<sub>2</sub> ont été estimées grâce aux compilations de Baulch *et al.* 1994 ; les paramètres cinétiques pour l'arrachement d'atomes d'hydrogène par les radicaux O, OH et H ont été estimés à partir des travaux de Marinov *et al.* 1996 et enfin, la cinétique de l'arrachement d'hydrogène par le radical méthyle a été estimée à partir des travaux de Colket *et al.* 1994.

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

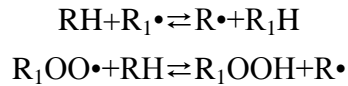
#### 3.4.4 Construction du mécanisme d'oxydation du carburant modèle de type gazole (70%*n*-décane+30% 1-méthylnaphtalène)

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

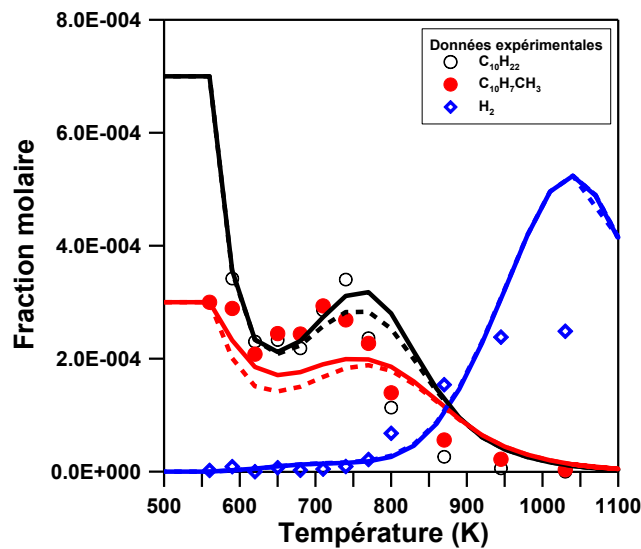
Le couplage de ces deux premiers mécanismes a simplement consisté à l'unification des mécanismes de base C<sub>0</sub>-C<sub>4</sub> (à partir de travaux de Diévert comme mentionné auparavant), puis on a renommé les espèces en suivant la nomenclature définie par Diévert pour le mécanisme d'oxydation du *n*-décane. Ensuite, les réactions redondantes ont été supprimées et, enfin, les réactions de croisement des espèces lourdes issues de l'oxydation des composés primaires ont été ajoutées au mécanisme. Les réactions ajoutées n'ont pas changé la performance du mécanisme pour l'oxydation du *n*-décane pur ou du 1-méthylnaphtalène pur. L'impact des réactions d'interaction mentionnées précédemment sera étudié plus en détails par la suite.

### 3.4.5 Influence des modifications apportées : réactions d'interaction

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



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



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

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



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



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

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

où  $\alpha = C_A/C_T$

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

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

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

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

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



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

### 3.4.6 Simulations en réacteur auto-agité

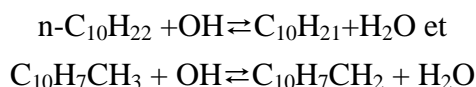
#### a) Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité

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

Ce modèle a aussi été validé pour l'oxydation en JSR du *n*-décane pur et du 1-méthylnaphtalène pur dans les mêmes conditions. Des exemples de résultats obtenus à 10 bar (Figure 64 à Figure 67) et 6 bar (Figure 65 à Figure 69). D'après les calculs, dans ces conditions, dans le régime de flamme froide (560 à 720K), le 1-méthylnaphtalène et le *n*-décane sont tous les deux oxydés, formant alors plusieurs produits et principalement, comme on peut le voir sur ces figures, de grandes quantités de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, et de formaldéhyde. On peut également observer sur ces figures que la modélisation prévoit assez bien ces profils de fractions molaires. De la même façon, la consommation du *n*-décane et du 1-méthylnaphtalène sont aussi en accord avec les résultats de la modélisation. Ceci est un résultat intéressant car, dans des conditions identiques, et en l'absence du *n*-décane, le 1-méthylnaphtalène ne réagirait pas. En effet, l'oxydation du 1-méthylnaphtalène survient grâce aux radicaux produits lors de l'oxydation du *n*-décane. Des calculs de sensibilité à 620K et dans les conditions d'un mélange pauvre ( $\phi=0.5$  à 10bar), montrent que les radicaux OH sont



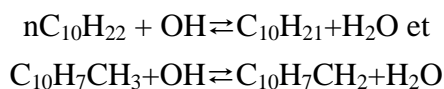
principalement responsables de l'oxydation du *n*-décane (ca. 79%) et du 1-méthylnaphtalène (ca.95%) via



Dans ces conditions, leur formation est dû à la décomposition des radicaux alkylhydroperoxy et des cétohydroperoxydes ( $\text{O}_2\text{QOOH}$  et  $\text{OQ}'\text{OOH}$ ) provenant de l'oxydation du *n*-décane. Dans les mêmes conditions, lorsque les processus d'oxydation des radicaux alkyles sont plus importants que les réactions de  $\beta$ -scissions, peu de formation d'éthylène est observée, en accord avec le modèle qui indique que celui-ci est produit par la décomposition du  $\text{C}_2\text{H}_4\text{OOH}$ .

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

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



Les réactions du *n*-décane avec les atomes O (10%) et H (4.5%) contribuent aussi à sa consommation. De la même façon, les atomes H consomment aussi le 1-méthylnaphtalène (7.5%). Dans ces conditions, la production d'éthylène est principalement due aux réactions de  $\beta$ -scission des radicaux alkyles (1-butyle, 11%; 1-propyle, 21%), tandis que l'oxydation du radical éthyle par l' $\text{O}_2$  contribue également à la formation d'éthylène (19%).

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

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

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

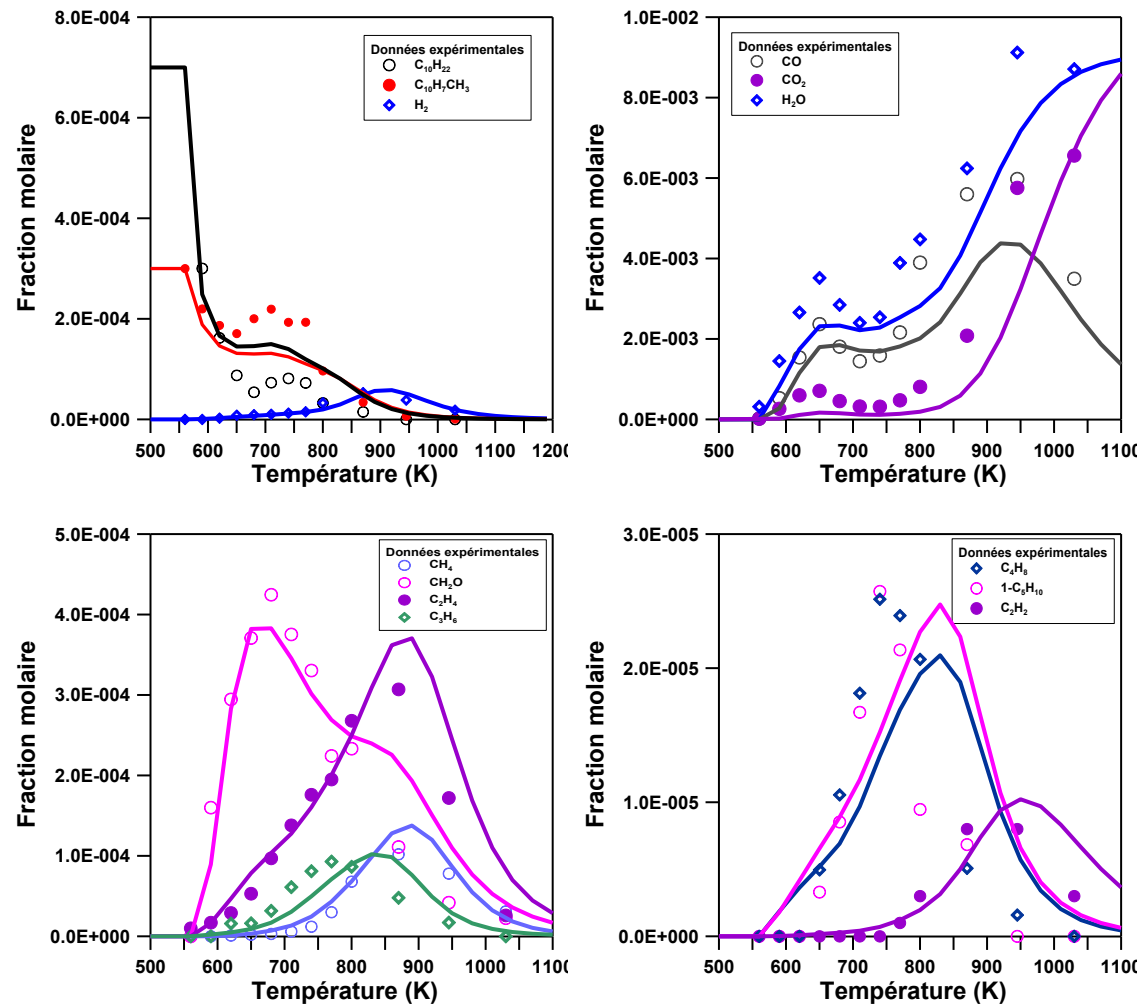


Figure 64. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR :  $\phi=0.25$ , 10bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

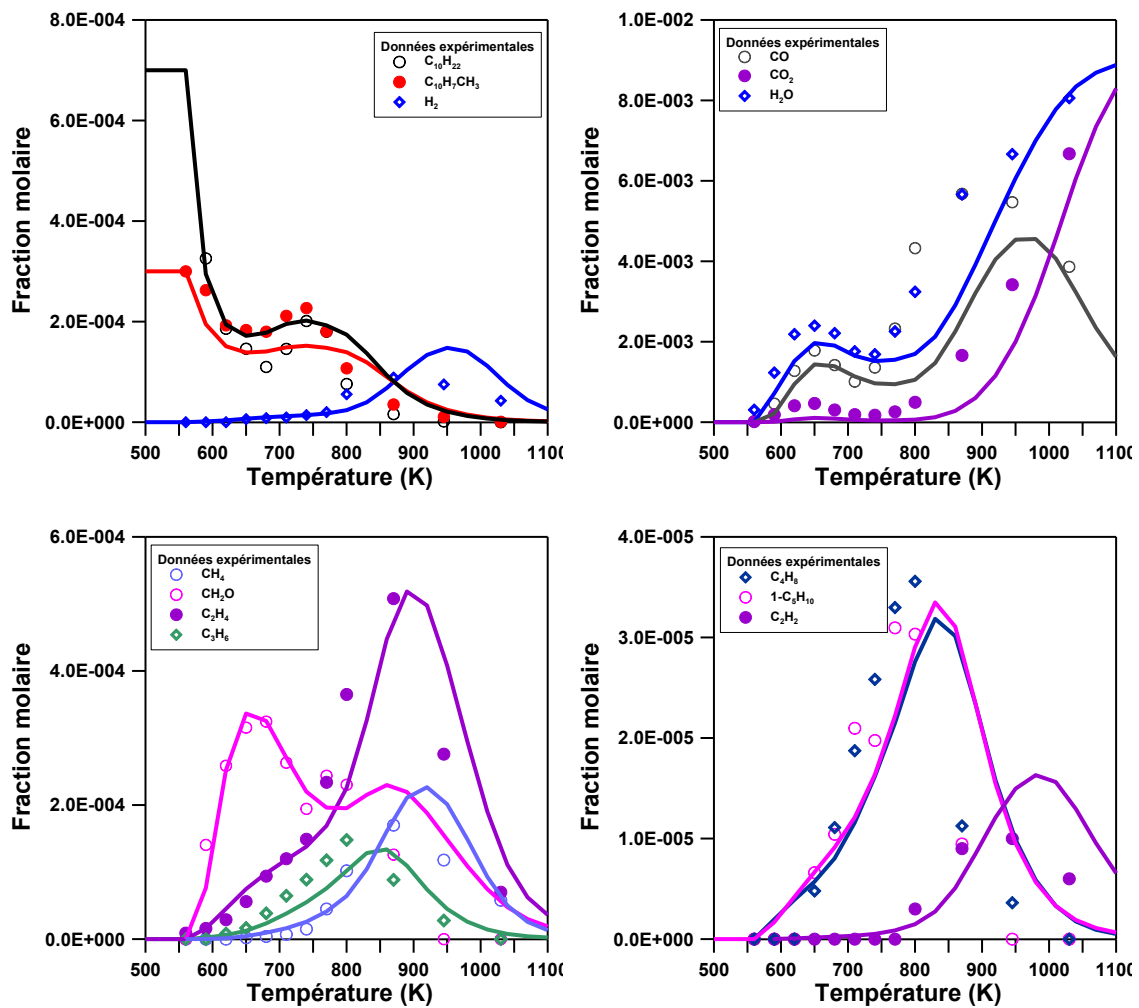


Figure 65. . Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR :  $\phi=0.5$ , 10bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

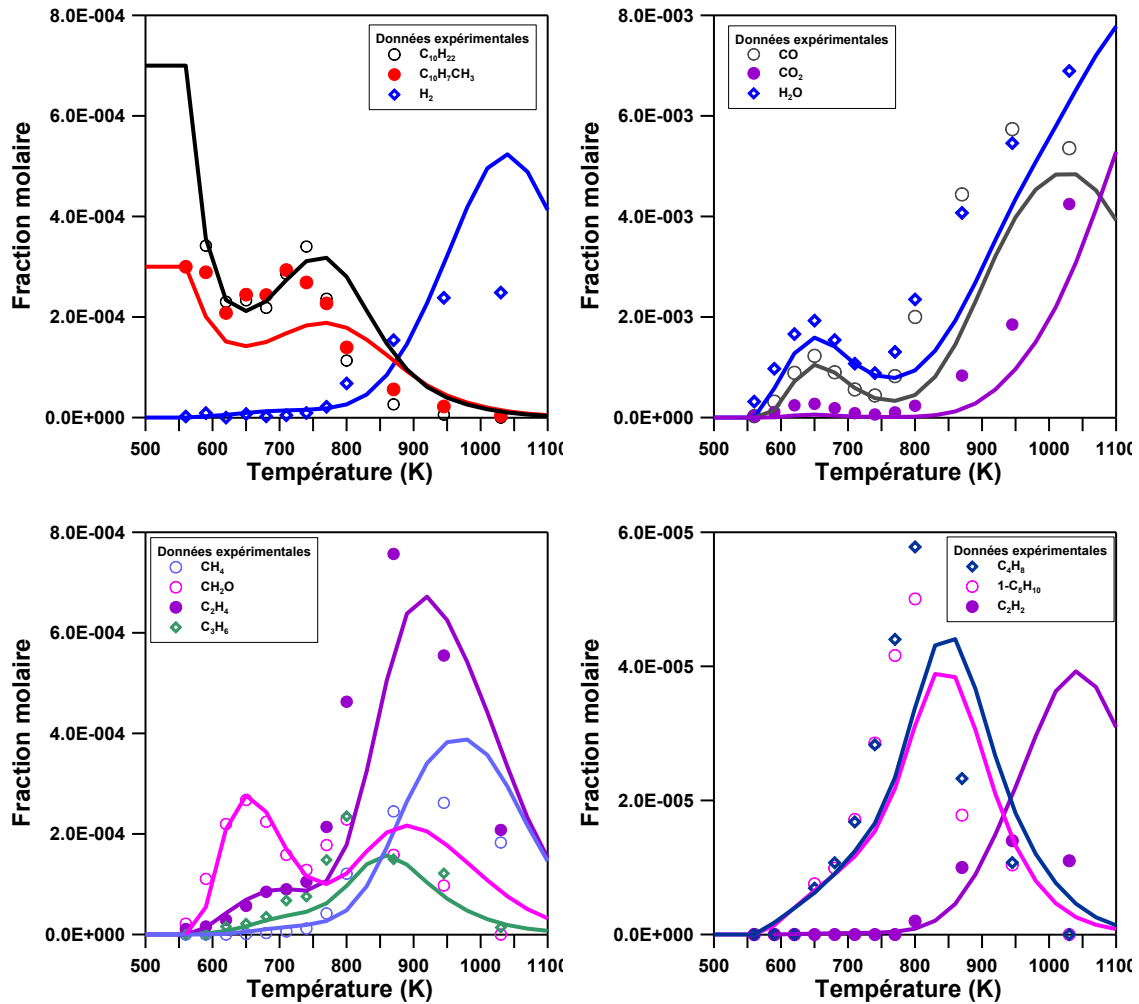


Figure 66. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR :  $\phi=1.0$ , 10bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

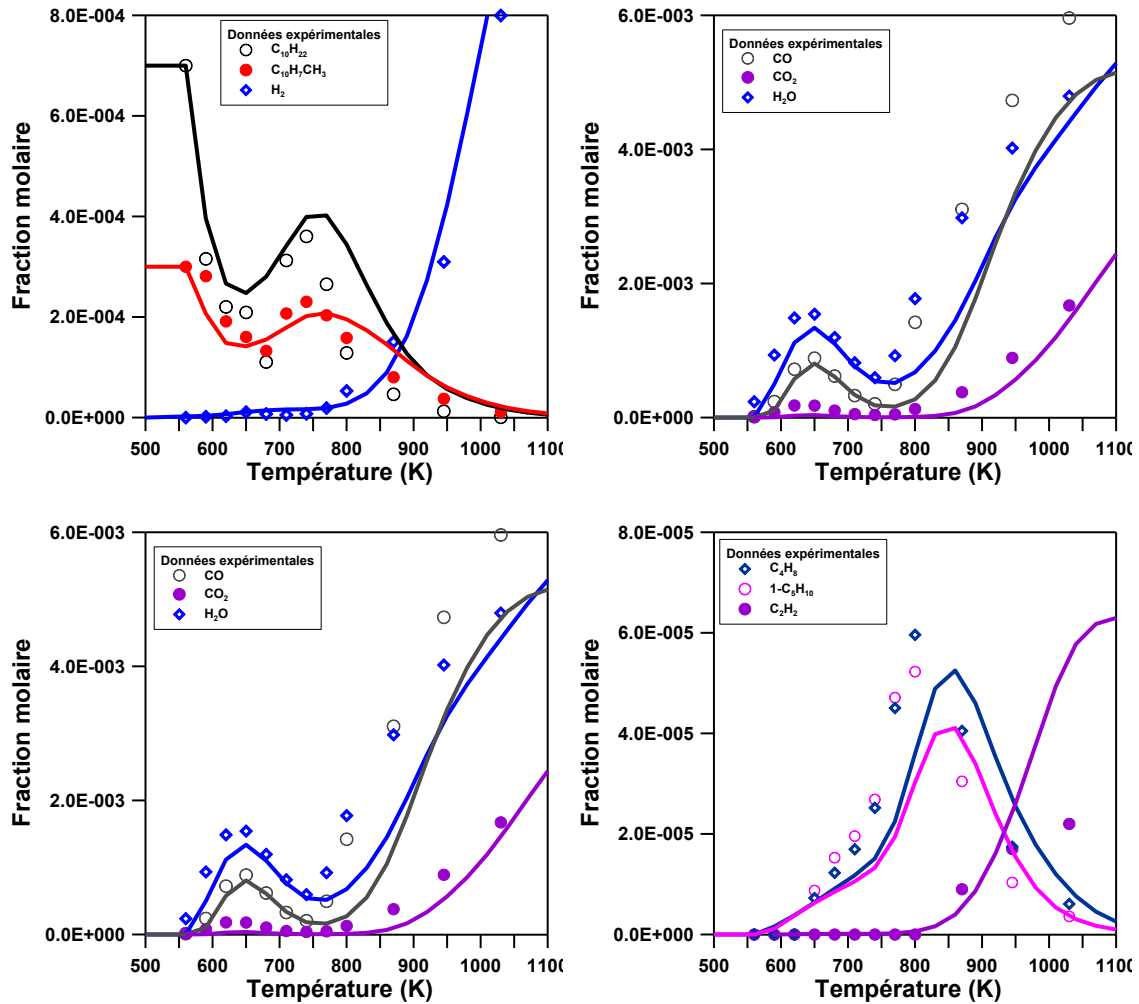


Figure 67. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR :  $\phi=1.5$ , 10bar et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

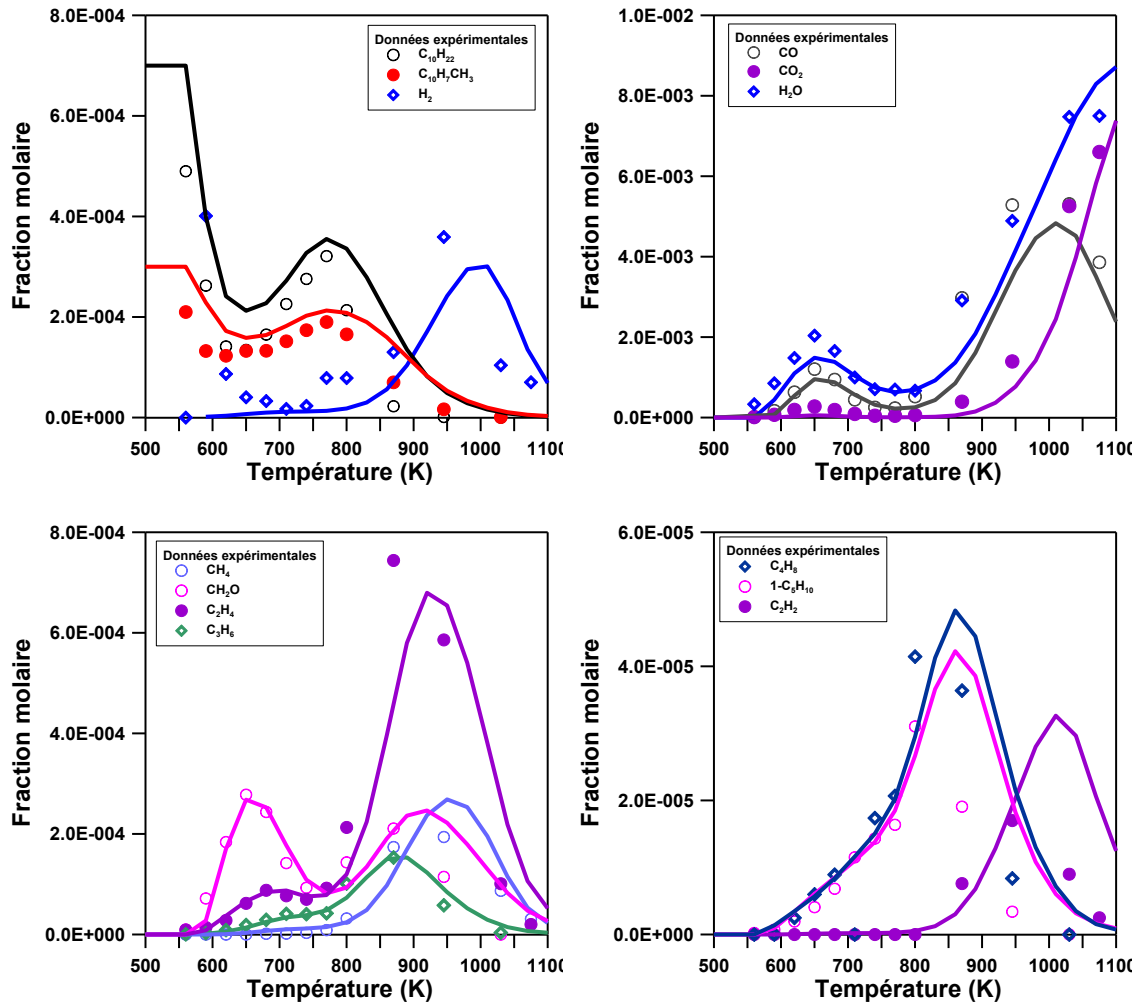


Figure 68. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR :  $\phi=0.5$ , 6bar et  $\tau=0.6s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

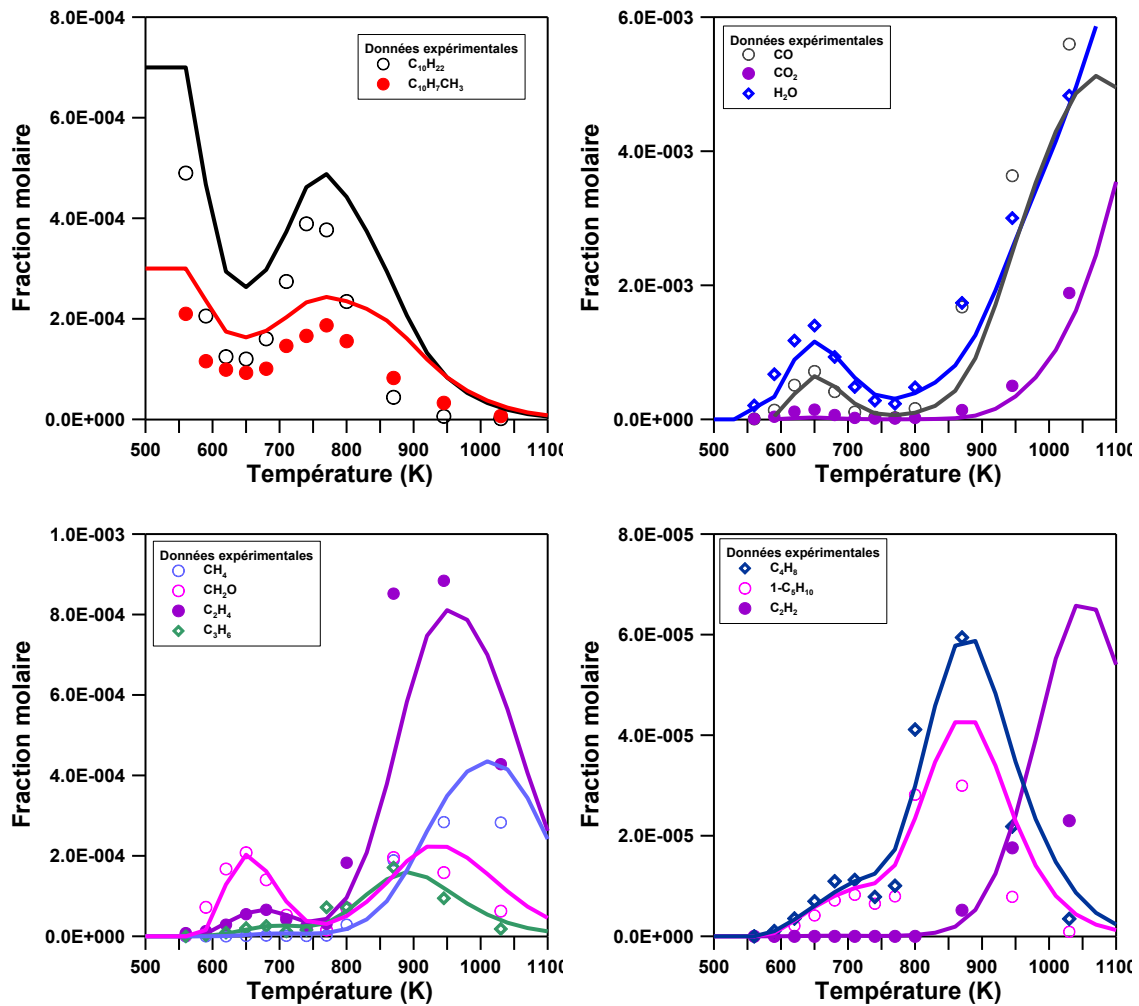


Figure 69. Confrontation du modèle (lignes) avec les expériences (symboles) lors de l'oxydation d'un carburant réel type gazole en JSR :  $\phi=1.0$  , 6bar et  $\tau=0.6s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

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

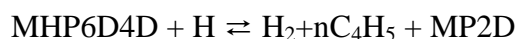
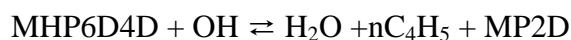
Après la consolidation du mécanisme d'oxydation du gazole (Ramirez L *et al.* 2010), le développement et la validation du mécanisme d'oxydation du B30 ont été menés à partir du modèle cinétique d'oxydation du gazole (*n*-décane et méthylnaphtalène) et du modèle d'oxydation de l'octanoate de méthyle de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

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

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

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

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



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



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

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

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

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

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

D'après les calculs, dans le régime de flamme froide (560–720 K), le méthyle octanoate, le 1-méthylnaphtalène et le *n*-décane sont oxydés, entraînant la formation de nombreux produits. Comme on peut le voir sur ces figures, de grandes quantités de CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, et de formaldéhyde sont formées dans la flamme froide (pics de concentration des intermédiaires observés à 650 K) et à haute température (pics de concentration de CO et CH<sub>2</sub>O observés entre 850 et 900 K). Le modèle cinétique prédit raisonnablement bien ces résultats dans la plupart des cas alors qu'il semble surestimer la fraction molaire de CH<sub>2</sub>O pour les mélanges pauvres (Figure 70). Comme pour les simulations de l'oxydation du gazole, les prédictions de la consommation des constituants du B30 modèle montrent un régime d'oxydation de flamme froide (560–800 K), un NTC (650–800 K), ainsi qu'une transition vers une oxydation de haute température (>800K) en accord avec les observations expérimentales.

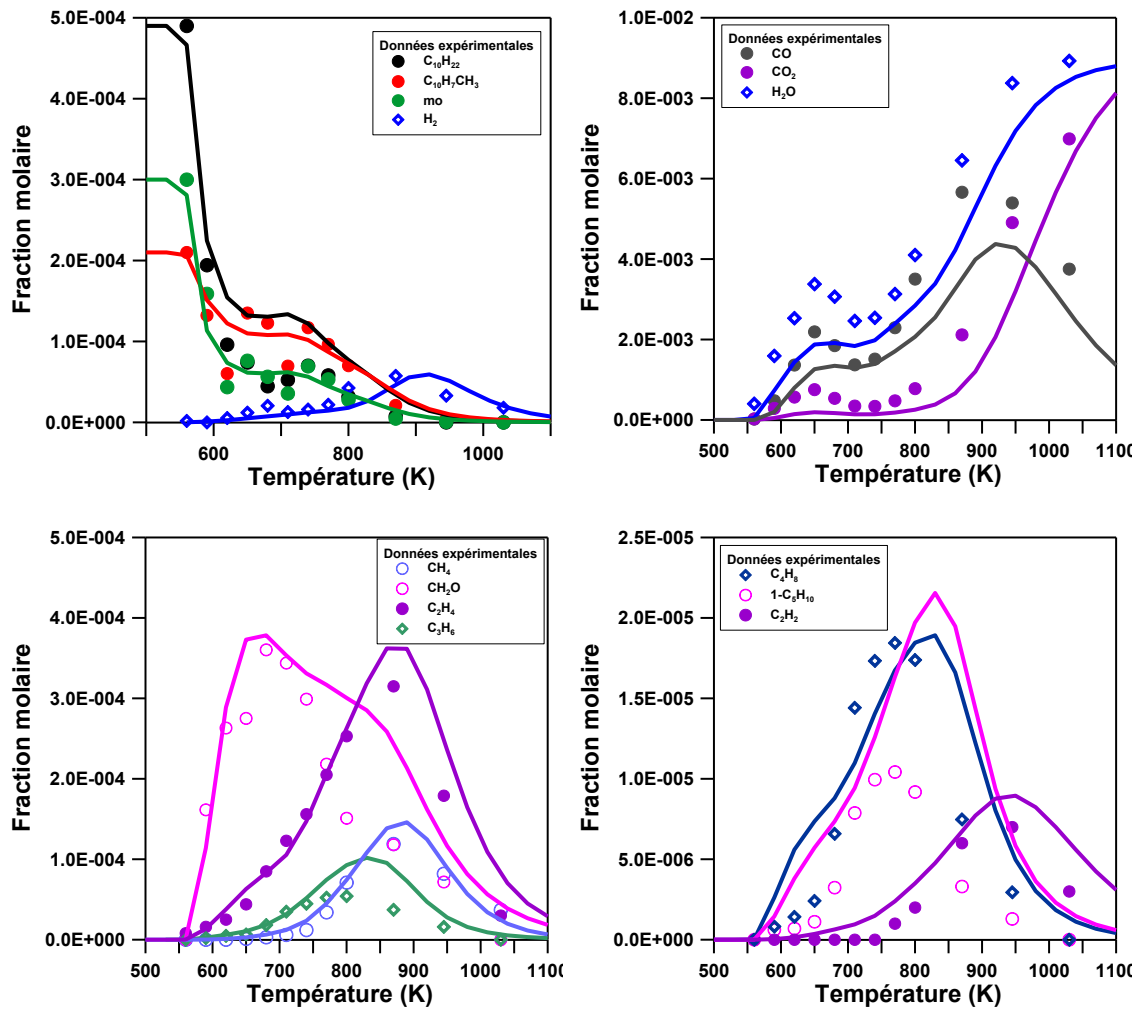


Figure 70. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar;  $\phi=0,25$  et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

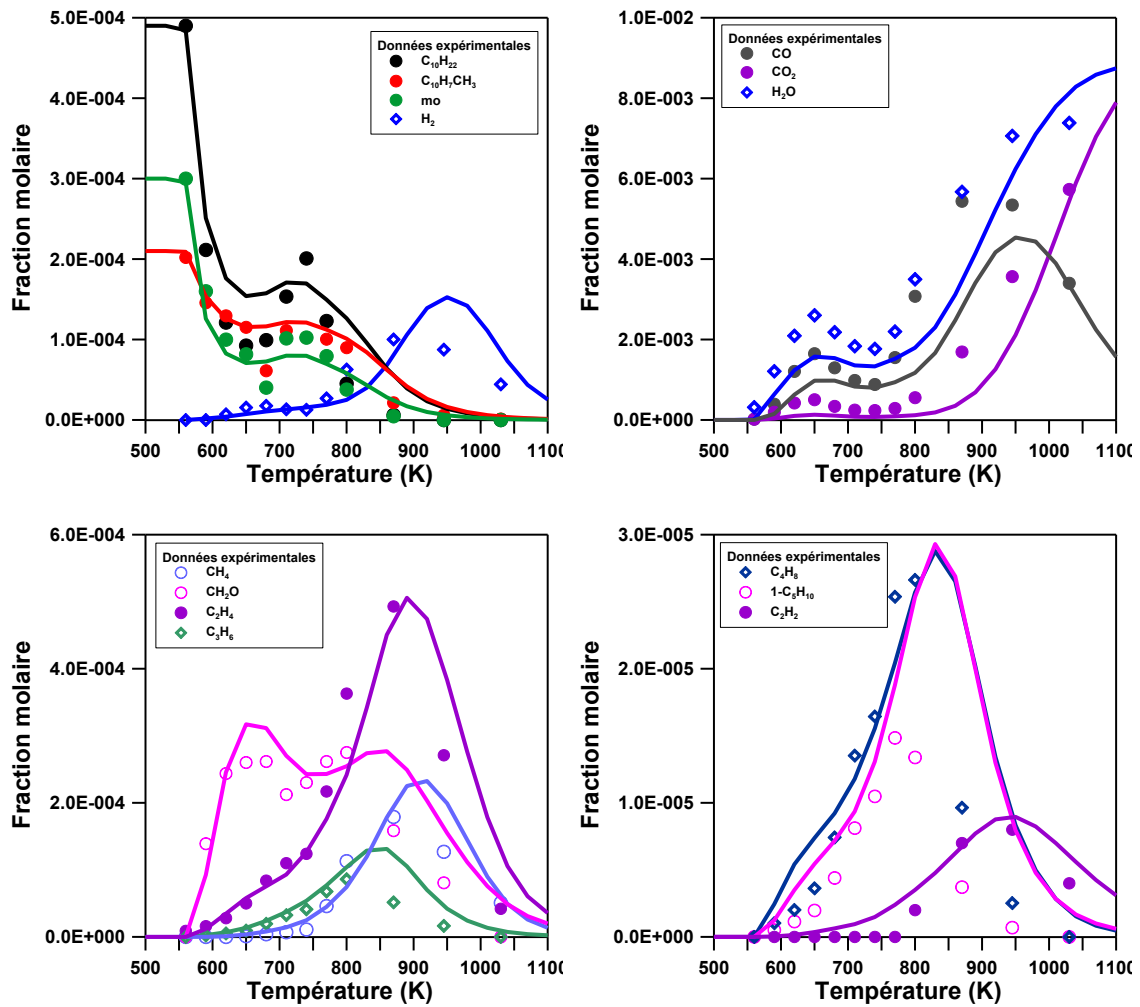


Figure 71. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar;  $\phi=0,5$  et  $\tau=1s$ ). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

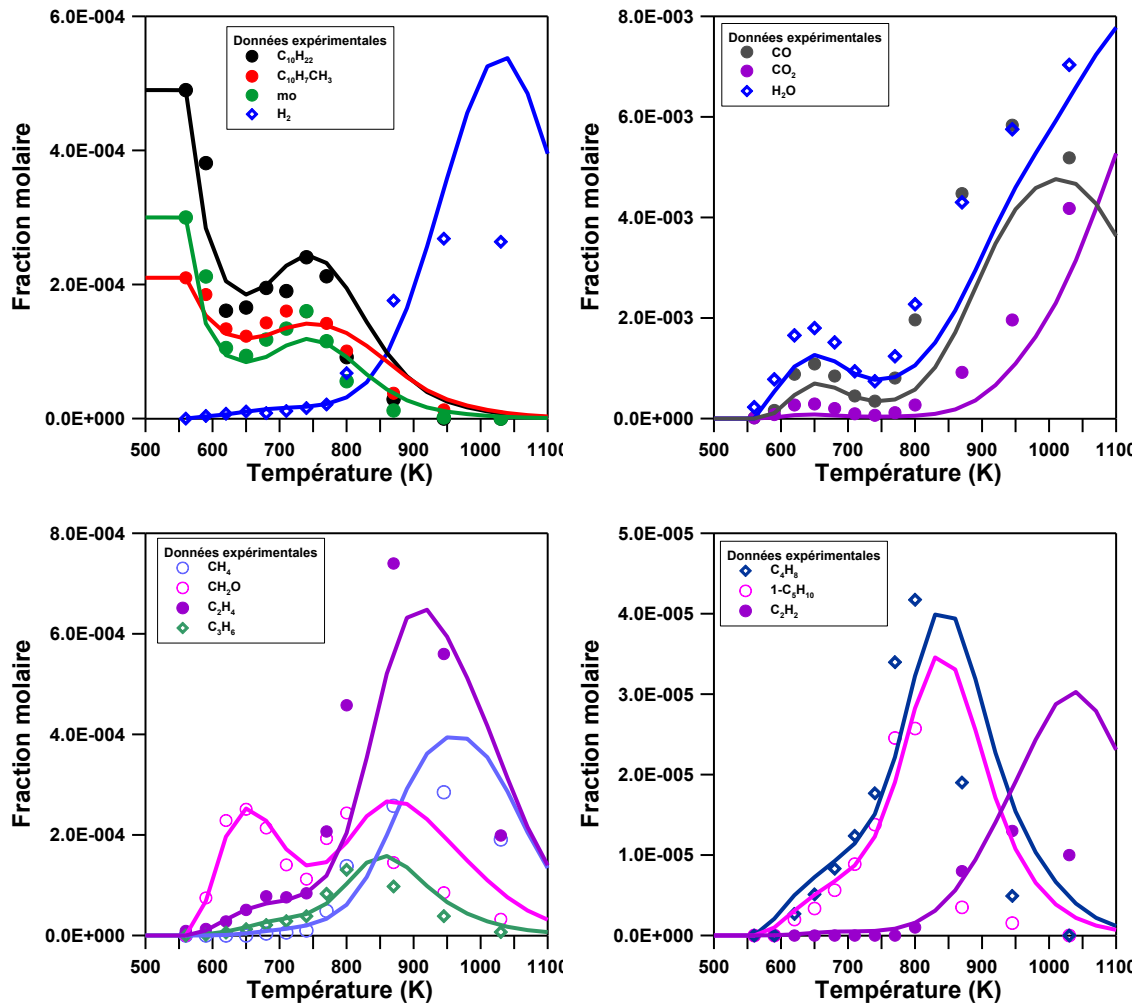


Figure 72. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar;  $\phi=1$  et  $\tau=1s$ ). Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

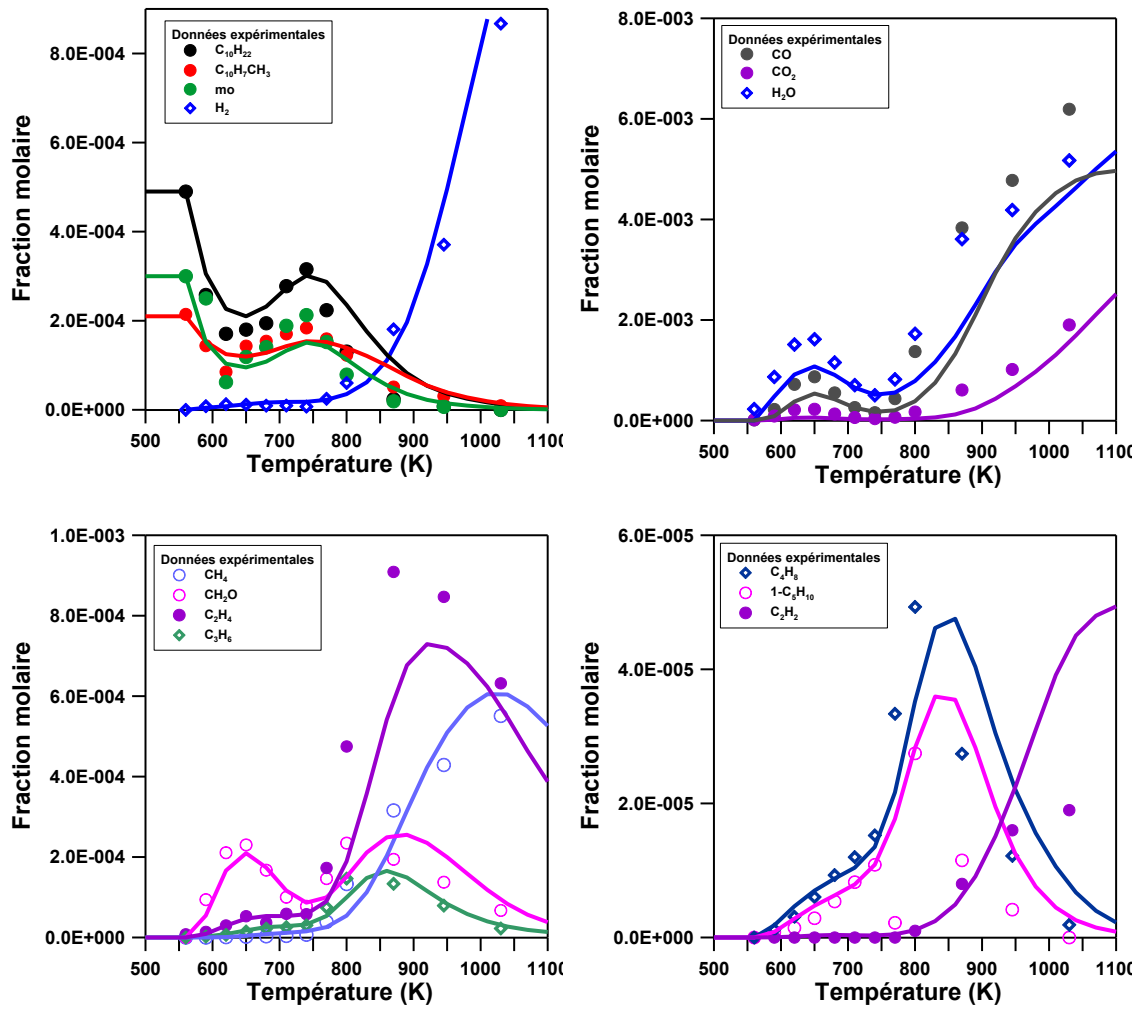


Figure 73. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 10 bar;  $\phi=1,5$  et  $\tau=1s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

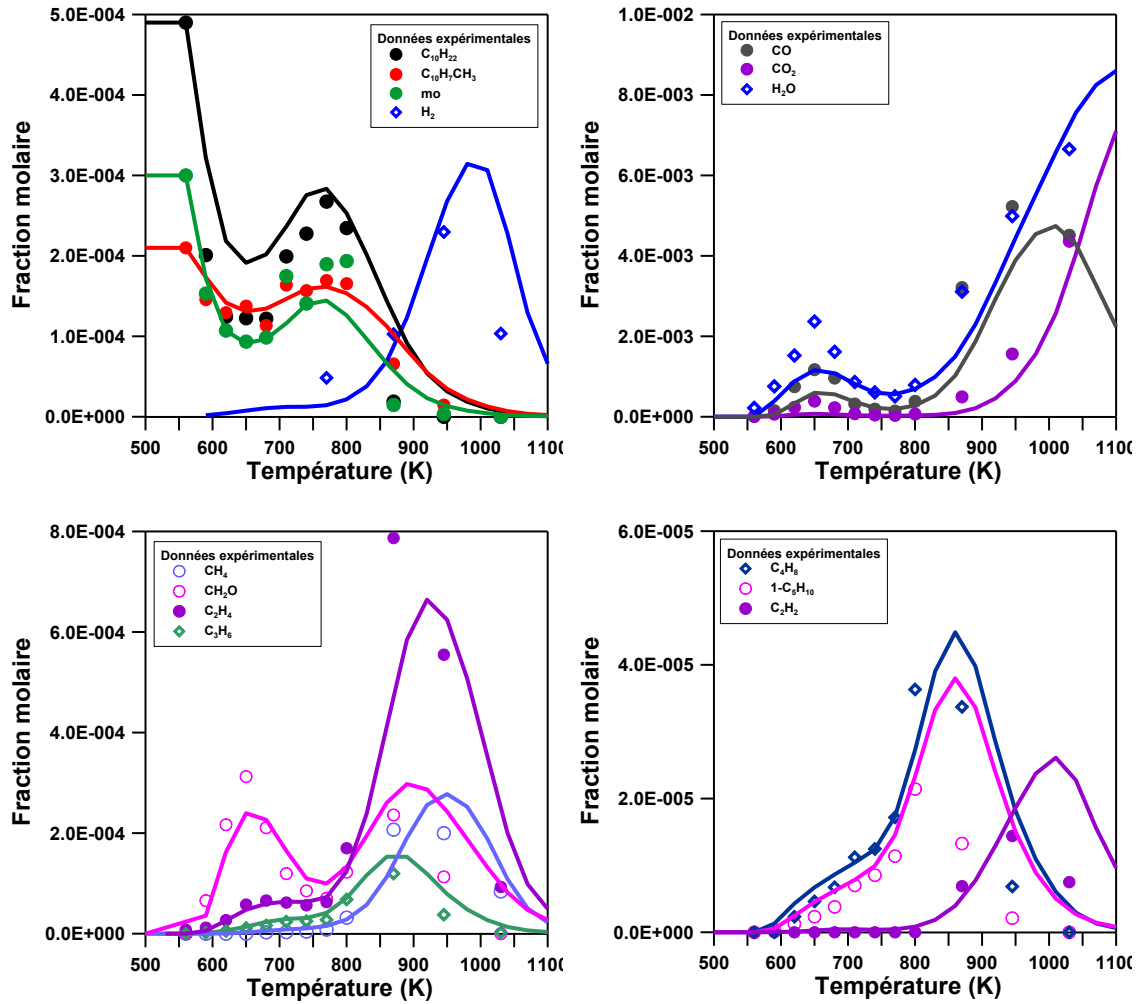


Figure 74. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 6 bar;  $\phi=0,5$  et  $\tau=0,6s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

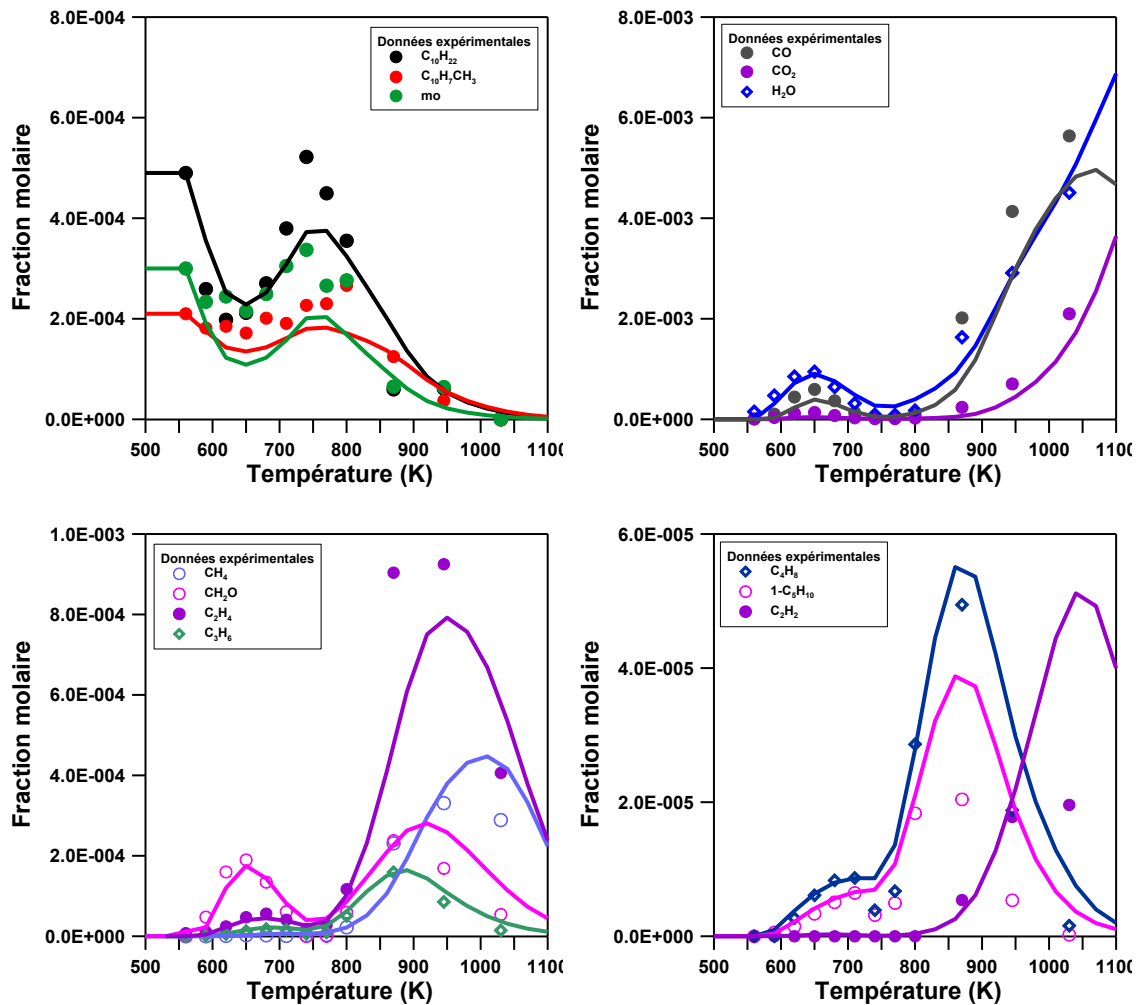


Figure 75. Confrontation modèle (lignes continues)-expérience (symboles): oxydation du B30 modèle en JSR à 6 bar;  $\phi=1$  et  $\tau=0,6s$ . Les incertitudes estimées sont de l'ordre de  $\pm 10\%$ .

### b) Analyse de sensibilité

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

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

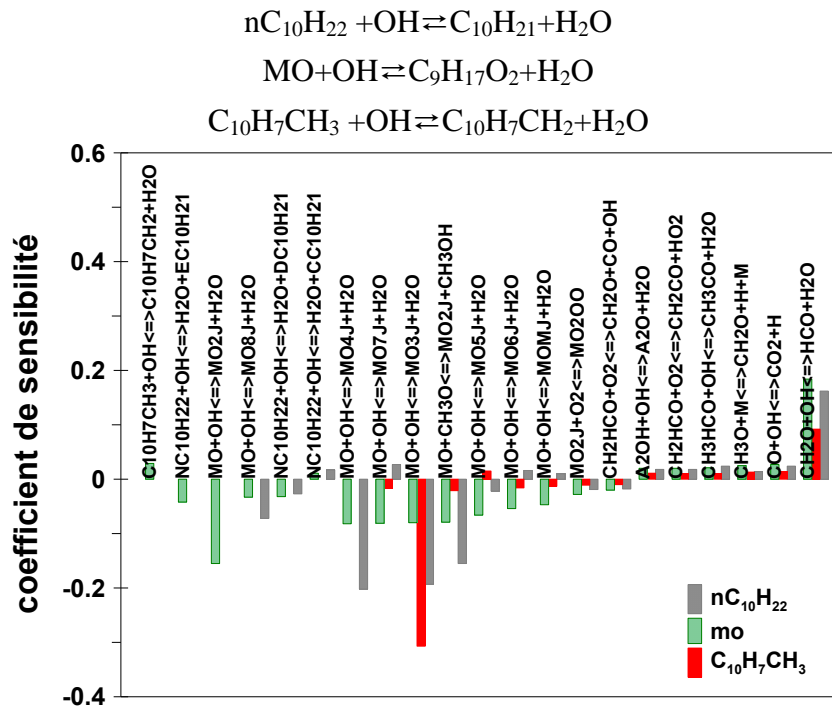
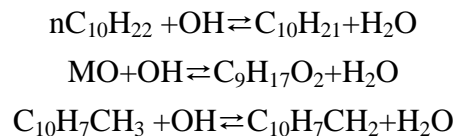


Figure 76. Coefficients de sensibilité pour le *n*-décane, l'octanoate de méthyle, et le 1-méthylnaphtalène lors de l'oxydation du carburant modèle type B30 en JSR à 10 bar et  $\varphi=0,5$  et 620K.

c) *Analyse de voies réactionnelles*

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

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

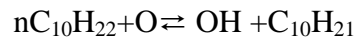
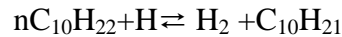
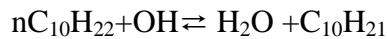


Ces réactions génèrent principalement les radicaux décyles,  $\text{moX}_j$  (radicaux issues de la décomposition de l'octanoate de méthyle) et du méthylnaphtyle. Dans ces conditions, les radicaux OH sont principalement formés à partir de la décomposition des alkylhydroperoxyde et céto hydroperoxydes ( $\text{O}_2\text{QOOH}$  et  $\text{OQ}'\text{OOH}$ ) dérivés de l'oxydation du *n*-décane et du méthyle octanoate. Lorsque les processus d'oxydation des radicaux d'alkyle sont moins importants que les réactions de  $\beta$ -scissions, on observe la formation d'éthylène ou de propène. En fait, le modèle indique que l'éthylène est principalement produit par la décomposition de  $\text{C}_2\text{H}_4\text{OOH}$ .



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

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



En parallèle, le 1-méthyl-naphtalène et l'octanoate de méthyle sont consommés également dans un premier temps par les réactions avec les radicaux OH et H pour former des radicaux  $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2$  (81%) et  $\text{moX}_j$  (63%) via :

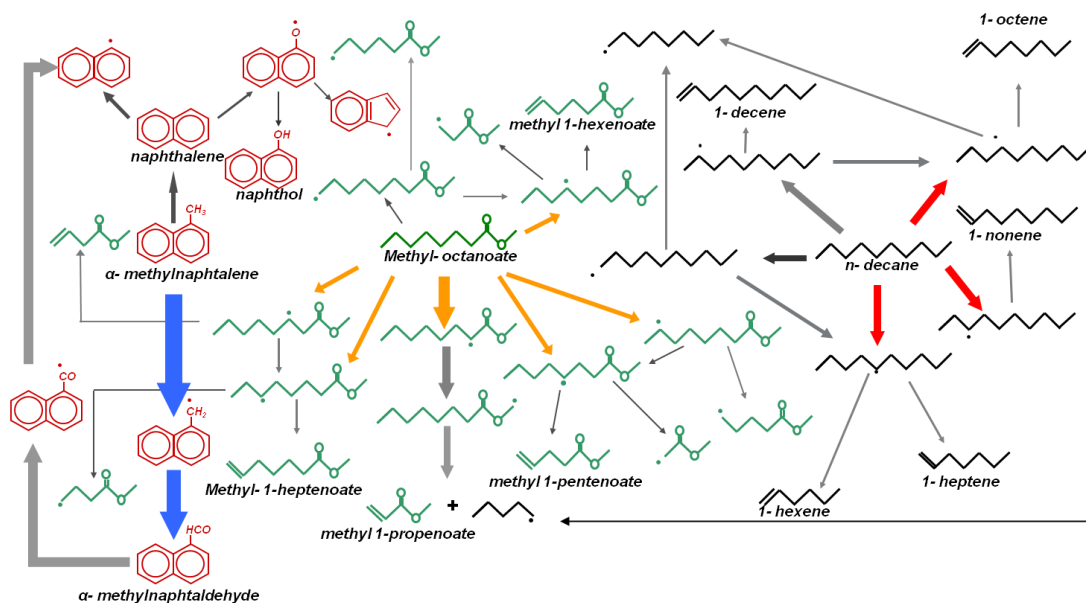
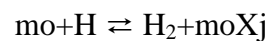
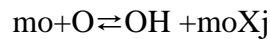
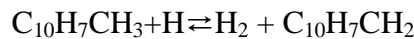
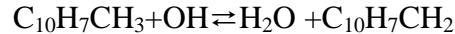


Figure 77. Principales voies de dégradation du carburant modèle type B30 (49/21/30 *n*-décane/1-méthyl-naphtalène/octanoate de méthyle en mole) : P=10 bar ,  $\phi=1$  and T=1030K.

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

## **Conclusion**

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

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

## Chapitre 4

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

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

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

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

#### 4.1 Le tube à choc

##### 4.1.1 Principe de fonctionnement d'un tube à choc

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

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

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

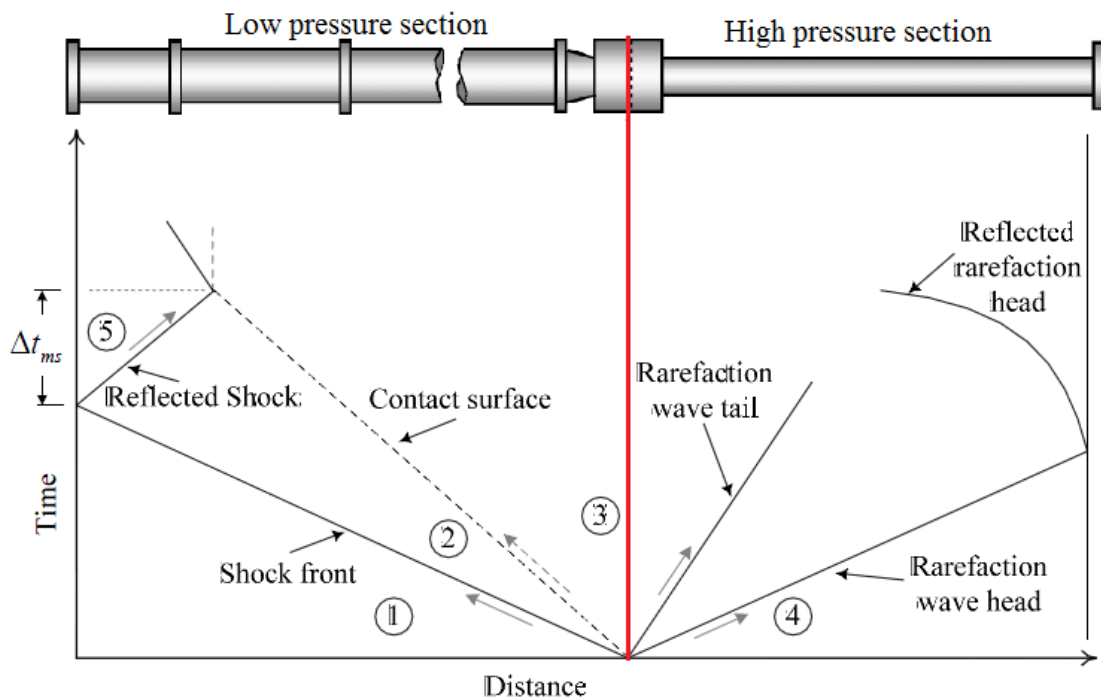


Figure 78. Schéma de principe temps - distance pour un tube à choc. Zone 1- mélange de gazeux d'essai, zone 2- gaz choqués (onde de choc incidente), zone 3- gaz inertes en expansion, zone 4- gaz inertes comprimés, zone 5- gaz choqués (onde de choc réfléchie).

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

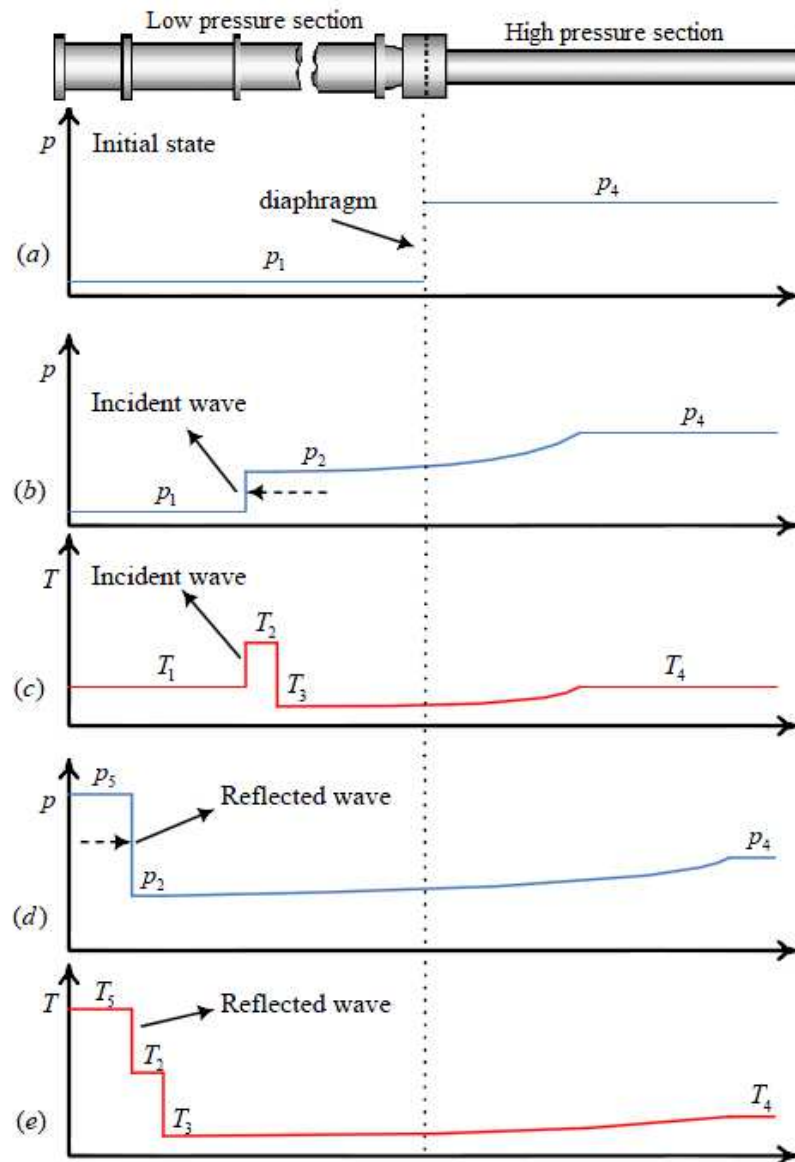


Figure 79. Fonctionnement d'un tube à choc, (a) état initial, (b) et (c) Propagation de l'onde de choc incidente, (d) et (e) propagation de l'onde de choc réfléchie (source : Cancino et al. 2009)

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

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

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

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

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

On pose :

$\rho_i$  : masse volumique des gaz dans l'état  $i$

$\rho_{ij}$  : rapport des masses volumiques des gaz dans les états  $i$  et  $j$

$u_i$  : vitesse des gaz par rapport à l'onde de choc dans l'état  $i$

$h_i$  : enthalpie des gaz dans l'état  $i$

$C_p$  : capacité calorifique à pression constante

$H_i$  : enthalpie molaire dans l'état  $i$

$H_{i0}$  : enthalpie molaire standard dans l'état  $i$

$M$  : masse molaire des gaz

$P_i$  : pression des gaz dans l'état  $i$

$R$  : constante des gaz parfaits par unité de mole ( $R=8,314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )

$R_s$  : constante des gaz parfaits par unité de masse ( $R_s=R/M$ )

$V_s$  : vitesse de l'onde de choc incidente par rapport au référentiel laboratoire

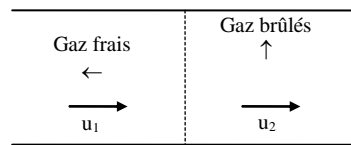
$V_r$  : vitesse de l'onde de choc réfléchie par rapport au référentiel laboratoire

indice 1 : gaz frais

indice 2 : derrière l'onde de choc incidente

indice 5 : derrière l'onde de choc réfléchie

On considère le passage des gaz à travers une surface unité du front de choc :



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

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (1)$$

$$\rho_1 u_1^2 + P_1 = \rho_2 u_2^2 + P_2 \quad (2)$$

$$h_1 + \frac{1}{2} u_1^2 = h_2 + \frac{1}{2} u_2^2 \quad (3)$$

Comme les gaz sont supposés parfaits :

$$P_1 = \rho_1 R_s T_1 \quad (4)$$

$$P_2 = \rho_2 R_s T_2 \quad (5)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

De (8), on déduit :

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

On définit les nombres de Mach  $M_1$  et  $M_2$  :

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

D'où :

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

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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

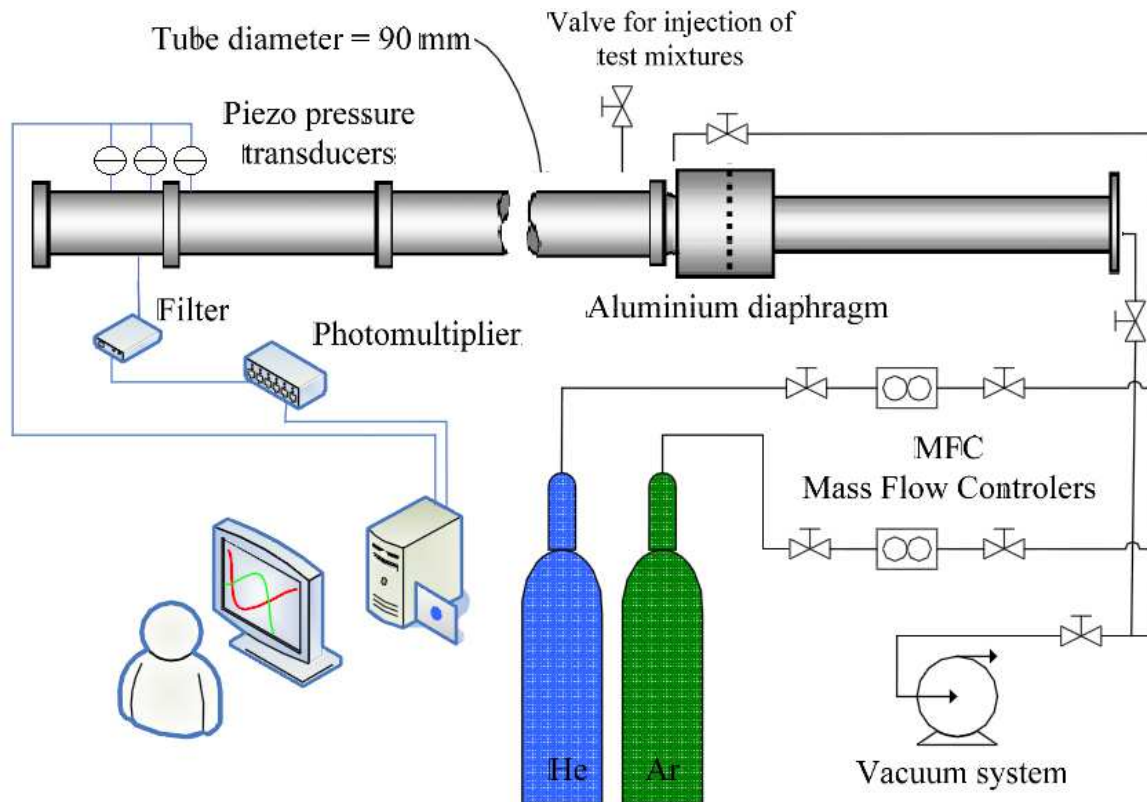


Figure 80. Schéma représentatif du tube à choc chauffé du laboratoire IVG – UDE (Allemagne).

## 4.2 Méthodologie

### 4.2.1 Incertitudes liées aux expériences en tube à choc

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

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

Comme pour l'étude en JSR, les composés hydrocarbonés de haute pureté, utilisés dans ces études, ont été achetés chez Aldrich : le *n*-décane avait une pureté >99%, le 1-méthyl-naphthalène avait une pureté >95%, et l'octanoate de méthyle avait une pureté de 99%. Les mélanges gazeux carburant/air ont été préparés à 130°C dans un réservoir en acier inoxydable avant de les introduire dans la section à basse pression. Les pressions du carburant et de l'air synthétique évaporés (79,5% N<sub>2</sub> et 20,5% O<sub>2</sub>) ont été contrôlées manométriquement pour garantir la richesse désirée.

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

Renault_Mixture_B -- Data for P5 = 20 bar -- $\phi = 1.0$							
Experiment	P1A (mbar)	P2 (atm)	T2 (K)	T5 (K)	V (m/s)	Vol Argon (m <sup>3</sup> /h)	Vol Helium (m <sup>3</sup> /h)
V	340.03	3.63	947.55	1500	1166.4	7.09	200.0
V	563.79	4.29	796.40	1200	989.3	16.40	200.0
V	697.66	4.62	746.05	1100	925.2	20.00	189.0
V	784.91	4.82	720.95	1050	892.0	20.00	167.0
V	1022.55	5.32	670.88	950	823.1	20.00	129.0
V	1397.60	6.01	621.15	850	750.7	20.00	96.8
V							
V							
Shock tube heating system: 403.15 K - ( 130 °C )							
Mixture:	**** Renault_Mixture_B_20_1.0 ****			Partial pressure [mbar]	Vol - liq [mL]		
n-Decane	P v = 283.06 mbar, @ 403.15 K			42.90	28.44	Fuel einfüllen auf [mbar]	
Methyl octanoate	P v = 144.08 mbar, @ 403.15 K			26.26	16.12		
1-methyl naphthalene	P v = 34.6 mbar, @ 403.15 K			18.39	8.72		
total pressure (m	6000.00			Total Vol Liq [mL]	53.278	87.561	
Helena, 06.09.2010 - IVG - UDE							

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

#### 4.2.3 Calculs du délai d'auto-inflammation

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

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

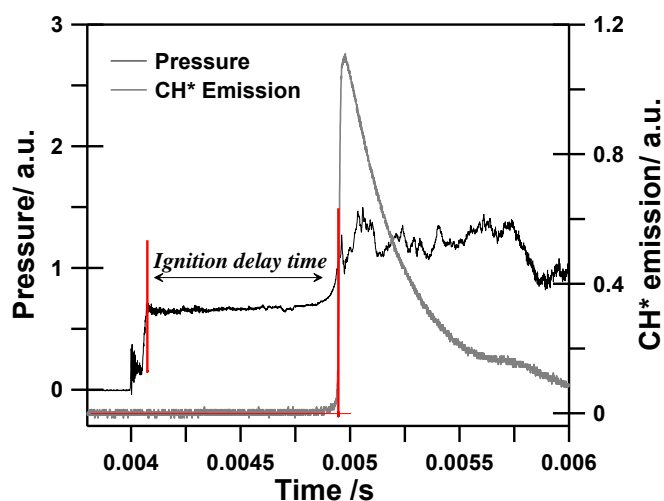


Figure 82. Profils de signaux de pression et d'émission de  $\text{CH}^*$  déterminant le délai d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 dans l'air à 40 bar, 916 K and  $\phi = 1.0$ .

### 4.3 Résultats expérimentaux

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

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

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

##### a) Conditions expérimentales

Les conditions sont récapitulées dans le Tableau 27.



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

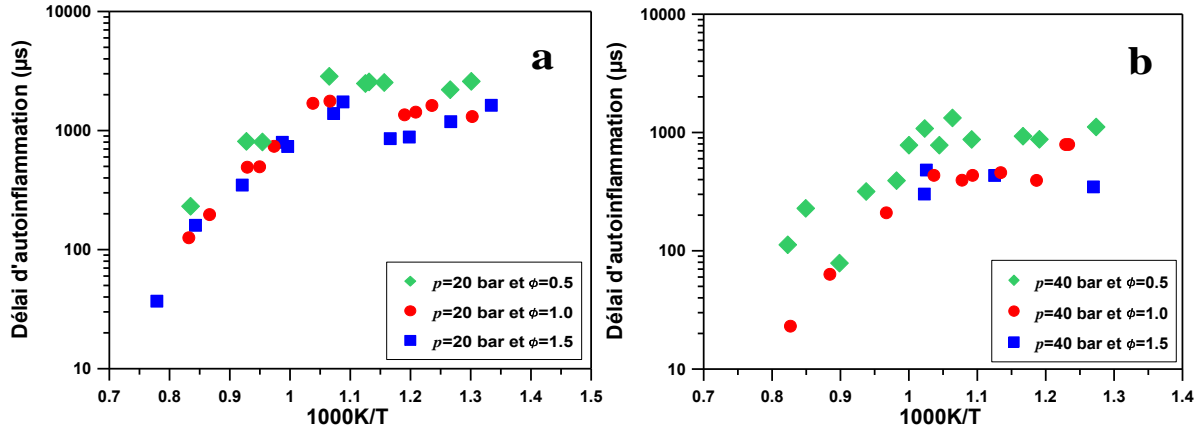


Figure 83. Résultats expérimentaux obtenus en tube à choc pour un carburant modèle B30. On peut noter le régime NTC au-delà de 919K :  $\phi=0,5$  (losanges),  $\phi=1,0$  (cercles) et  $\phi=1,5$  (carrés), à 20 bar (a) et 40 bar (b).

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

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

où

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

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

$$\begin{aligned} \text{pour } \phi = 0.5 & \quad \tau_{ign} = 3.1829 \times \exp(9021.2 \text{ K}/T) (p/\text{bar})^{-1.008}, \\ \text{pour } \phi = 1.0 & \quad \tau_{ign} = 0.8363 \times \exp(11880.8 \text{ K}/T) (p/\text{bar})^{-1.639} \text{ et} \\ \text{pour } \phi = 1.5 & \quad \tau_{ign} = 2.3334 \times \exp(11539.0 \text{ K}/T) (p/\text{bar})^{-1.964}. \end{aligned}$$

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

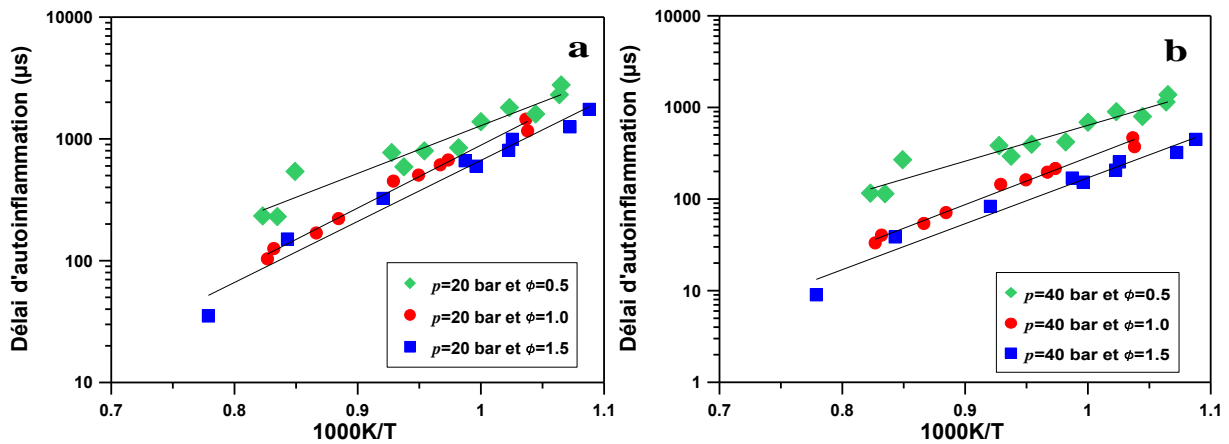


Figure 84. Délais d'auto-inflammation normalisés pour le carburant modèle B30 dans l'air à  $\phi=0,5$  (losanges),  $\phi=1,0$  (cercles) et  $\phi=1,5$  (carrés), et deux différentes pressions 20 bar (a) et 40 bar (b). Les lignes correspondent aux corrélations d'Arrhenius.

c) *Influence de la richesse*

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

d) *Influence de la pression*

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

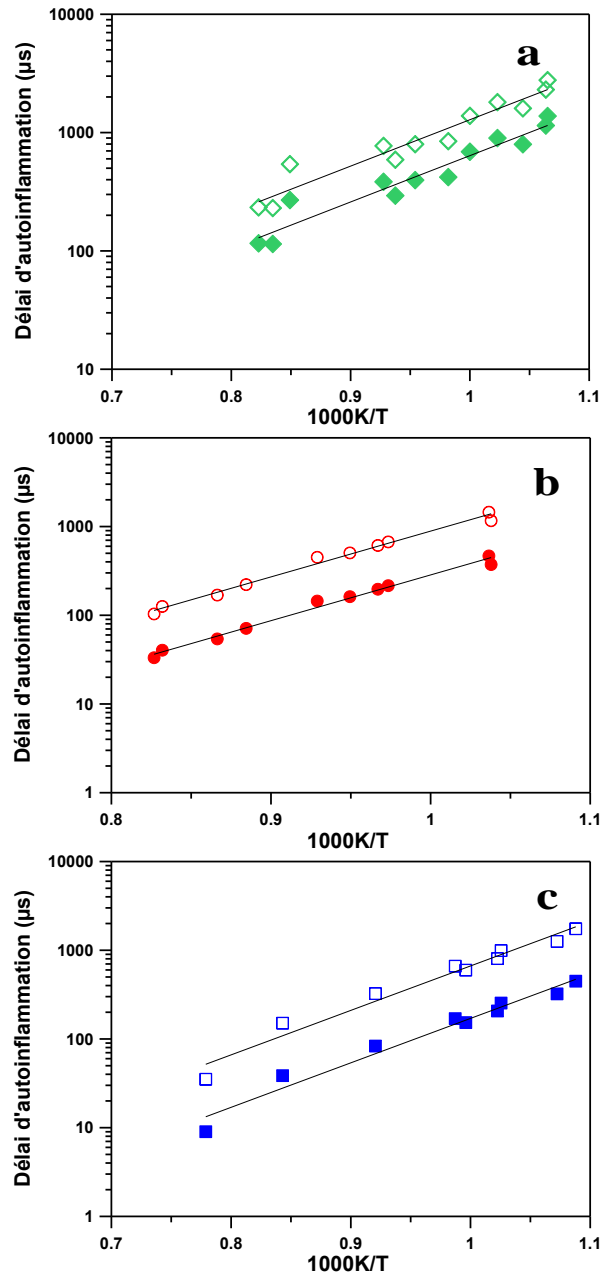


Figure 85. Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation normalisé pour le carburant modèle B30 dans l'air à  $\phi=0,5$  (a),  $\phi=1,0$  (b) et  $\phi=1.5$  (c), à deux pressions, i.e. 20 bar (symboles vides) et 40 bar (symboles pleins). Les lignes représentent les corrélations d'Arrhenius.

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



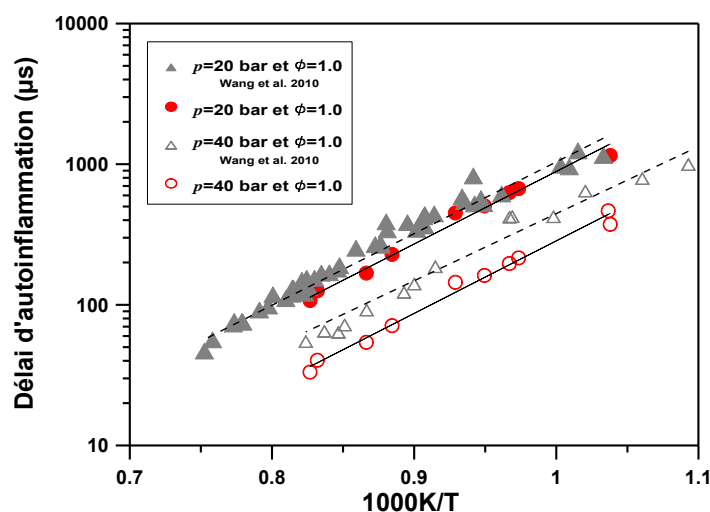


Figure 86. Influence de la pression sur les délais d'auto-inflammation du carburant modèle type B30-(cercles) et d'un carburant modèle type gazole (Wang *et al.* 2010, triangles) à 20 bar (symboles pleins) et à 40 bar (symboles vides). Les lignes correspondent à la corrélation d'Arrhenius.

## 4.4 Modélisation

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

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

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

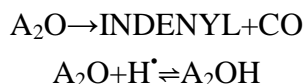
### 4.4.1 Influence des modifications apportées

#### c) Réévaluation des constantes de vitesse

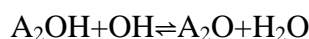
La première modification apportée concerne la réaction  $\text{HCCO} + \text{O}_2$ . En effet, Klippenstein *et al.* 2002 ont étudié cette réaction en 2002 et ont démontré que les

produits dominant de cette réaction sont  $\text{CO}_2 + \text{CO} + \text{H}^\bullet$ ,  $k = 4,78 \cdot 10^{12} \cdot \text{T}^{-0,42} \exp(-1150/\text{RT})$ .

Une autre modification concerne cette fois les vitesses de réactions de décomposition du radical naphtoxyle  $\text{A}_2\text{O}$ , ainsi que sa réaction avec un atome d'hydrogène ( $\text{H}^\bullet$ ) via les réactions:



Pour la réaction de décomposition, la constante de vitesse proposée par Narayanaswamy *et al.* 2010, dans son modèle d'oxydation de composés aromatiques, a été prise en compte :  $k = 2,9 \cdot 10^{10} \exp(-36424/\text{RT})$ . Nous avons également ajusté le facteur pré-exponentiel de l'équation d'Arrhenius, pour l'addition d'hydrogène au radical naphtoxyle, en le multipliant par un facteur 1,40 :  $k = 7,06 \cdot 10^{14}$ . Enfin, une autre modification importante est celle apportée à la constante de vitesse de la réaction du naphtol avec le radical  $\text{OH}^\bullet$  via :



Nous avons également ajusté le facteur pré-exponentiel de l'équation d'Arrhenius en le multipliant par un facteur 3 :  $k = 9 \cdot 10^{13}$ .

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

Réaction	Original			Modifié		
	A	n	E	A	n	E
$\text{A}_2\text{O} \rightarrow \text{INDENYL} + \text{CO}$	7.40E+11	0.0	43853.0	2.90E+10	0.0	36424
$\text{A}_2\text{O} + \text{H}^\bullet \rightleftharpoons \text{A}_2\text{OH}$	5.06E+14	0.0	0.0	7.06E+14	0.0	0.0
$\text{A}_2\text{OH} + \text{OH}^\bullet \rightleftharpoons \text{A}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	3.00E+13	0.0	0.0	9.00E+13	0.0	0.0

d) *Ajout de nouvelles réactions*

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

Les réactions du benzyle avec l'oxygène pour produire du benzaldéhyde et du phénoxy, les réactions du xylyle avec de l'oxygène pour produire du tolualdéhyde, du toluène, du méthylphényle et du benzoxy, la décomposition du xylène, et les réactions du benzaldéhyde avec H, O, OH, O<sub>2</sub>, HO<sub>2</sub>, et CH<sub>3</sub> ont été considérées. De la même façon, on a considéré les réactions de memj ( $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{OCH}_2^\bullet$ ) et  $\text{C}_9\text{H}_{19}\text{CO}$  issues du mécanisme du modèle de bio-Diesel d'Herbinet *et al.* 2010, et les réactions de

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

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

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

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

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

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

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

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

$\text{CC}_7\text{H}_{15}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{phCH}_2+\text{nC}_7\text{H}_{16}$	1.000E+11	0.00	12000
$\text{DC}_7\text{H}_{15}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{phCH}_2+\text{nC}_7\text{H}_{16}$	1.000E+11	0.00	12000
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qjA}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qA}+\text{phCH}_2$	4.000E+11	0.00	14000
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qjB}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qC}+\text{phCH}_2$	4.000E+11	0.00	14000
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qjD}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qD}+\text{phCH}_2$	4.000E+11	0.00	14000
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_7\text{H}_{16}\rightleftharpoons\text{AC}_7\text{H}_{15}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15000
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_7\text{H}_{16}\rightleftharpoons\text{BC}_7\text{H}_{15}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15000
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_7\text{H}_{16}\rightleftharpoons\text{CC}_7\text{H}_{15}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15000
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_7\text{H}_{16}\rightleftharpoons\text{DC}_7\text{H}_{15}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15000
$\text{C}_7\text{H}_{14}\text{-1}+\text{phCH}_2\rightleftharpoons\text{CC}_7\text{H}_{13}\text{-1}+\text{toluene}$	1.000E+11	0.00	17000
$\text{C}_7\text{H}_{14}\text{-2}+\text{phCH}_2\rightleftharpoons\text{DC}_7\text{H}_{13}\text{-1}+\text{toluene}$	1.000E+11	0.00	17000
$\text{C}_7\text{H}_{14}\text{-3}+\text{phCH}_2\rightleftharpoons\text{AC}_7\text{H}_{13}\text{-3}+\text{toluene}$	1.000E+11	0.00	17000
$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{-1}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{CC}_{10}\text{H}_{19}\text{-1}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3$	1.000E+11	0.00	17000
$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{-2}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{DC}_{10}\text{H}_{19}\text{-2}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3$	1.000E+11	0.00	17000
$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{-3}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{EC}_{10}\text{H}_{19}\text{-3}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3$	1.000E+11	0.00	17000
$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{-4}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{FC}_{10}\text{H}_{19}\text{-4}+\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3$	1.000E+11	0.00	17000
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qjA}+\text{phHCO}\rightleftharpoons\text{phCO}+\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qA}$	3.000E+12	0.00	9000
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qjB}+\text{phHCO}\rightleftharpoons\text{phCO}+\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qA}$	3.000E+12	0.00	9000
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qjC}+\text{phHCO}\rightleftharpoons\text{phCO}+\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qA}$	3.000E+12	0.00	9000
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qjD}+\text{phHCO}\rightleftharpoons\text{phCO}+\text{C}_7\text{H}_{15}\text{qA}$	3.000E+12	0.00	9000
$\text{AC}_8\text{H}_{17}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{phCH}_2+\text{nC}_8\text{H}_{18}$	2.000E+11	0.00	14000
$\text{BC}_8\text{H}_{17}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{phCH}_2+\text{nC}_8\text{H}_{18}$	1.000E+11	0.00	12000
$\text{CC}_8\text{H}_{17}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{phCH}_2+\text{nC}_8\text{H}_{18}$	1.000E+11	0.00	12000
$\text{DC}_8\text{H}_{17}+\text{toluene}\rightleftharpoons\text{phCH}_2+\text{nC}_8\text{H}_{18}$	1.000E+11	0.00	12000
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_8\text{H}_{18}\rightleftharpoons\text{AC}_8\text{H}_{17}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15500
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_8\text{H}_{18}\rightleftharpoons\text{BC}_8\text{H}_{17}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15500
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_8\text{H}_{18}\rightleftharpoons\text{CC}_8\text{H}_{17}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15500
$\text{C}_6\text{H}_5+\text{nC}_8\text{H}_{18}\rightleftharpoons\text{DC}_8\text{H}_{17}+\text{C}_6\text{H}_6$	9.000E+11	0.00	15500
$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{ojA}+\text{A}_2\text{OH}\rightarrow\text{naphthalene}+\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{rDqA}$	3.000E+12	0.00	00
$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{ojB}+\text{A}_2\text{OH}\rightarrow\text{naphthalene}+\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{rAqB}$	3.000E+12	0.00	00
$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{ojC}+\text{A}_2\text{OH}\rightarrow\text{naphthalene}+\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{rAqC}$	3.000E+12	0.00	00
$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{ojD}+\text{A}_2\text{OH}\rightarrow\text{naphthalene}+\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{rAqD}$	3.000E+12	0.00	00
$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{ojE}+\text{A}_2\text{OH}\rightarrow\text{naphthalene}+\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{rAqE}$	3.000E+12	0.00	00
$\text{A}_2\text{oh}+\text{AC}_{10}\text{H}_{21}\rightarrow\text{naphthalene}+\text{OH}+\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{-1}$	1.000E+11	0.00	9500

A2oh+ BC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> →naphthalene+OH+C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> -2	1.000E+11	0.00	9500
A2oh+ CC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> →naphthalene+OH+C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> -3	1.000E+11	0.00	9500
A2oh+ DC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> →naphthalene+OH+C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> -4	1.000E+11	0.00	9500
A2oh+ DC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> →naphthalene+OH+C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> -5	1.000E+11	0.00	9500
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qjA+phHCO→phCO+ C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qA	3.000E+12	0.00	9000
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qjB+phHCO→phCO+ C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qB	3.000E+12	0.00	9000
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qjC+phHCO→phCO+ C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qC	3.000E+12	0.00	9000
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qjD+phHCO→phCO+ C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qD	3.000E+12	0.00	9000
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qjE+phHCO→phCO+ C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> qE	3.000E+12	0.00	9000
A2R5+O <sub>2</sub> →A2-X+2CO+H	9.570e+20	-2.27	7189
napht+O <sub>2</sub> →indenoxy+CO+H	3.000e+13	0.00	8982
memj+O <sub>2</sub> ⇌memOO	4.520e+12	0.00	00
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> CO+O <sub>2</sub> ⇌C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> COOO	4.520e+12	0.00	00

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

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

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

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

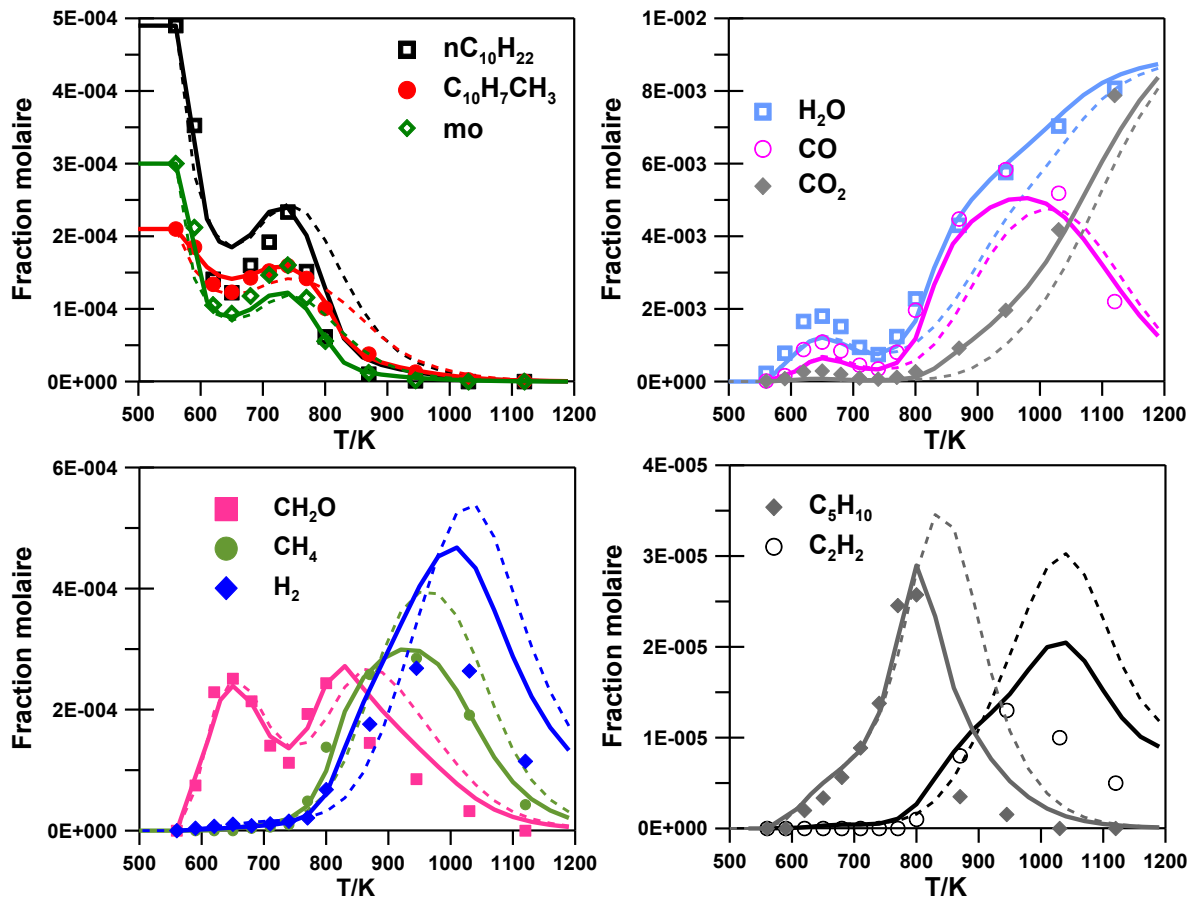


Figure 87. Oxydation du carburant modèle B30 en JSR :  $P= 10$  bar,  $\tau = 1$  s et  $\phi = 1$ . Symboles: résultats expérimentaux. Lignes continues: mécanisme modifié, Lignes en pointillés: mécanisme précédent.

#### 4.4.2 Confrontation modèle-expérience en tube à choc

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

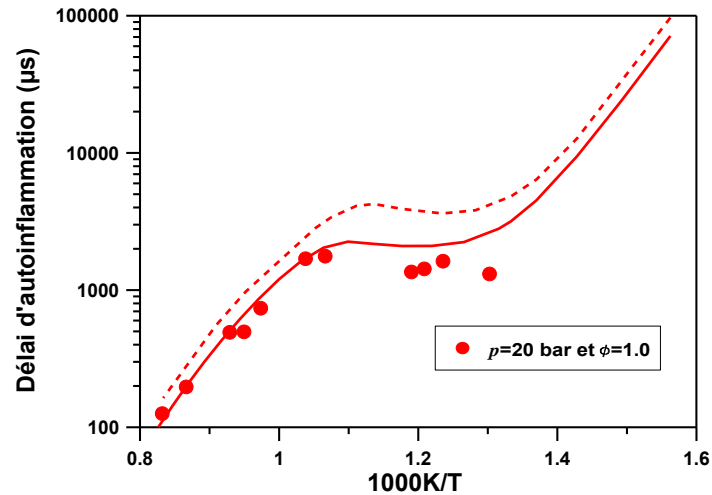


Figure 88. Délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle type B30 dans l'air:  $\phi = 1.0$  et 20 bar. Ligne continue : nouveau mécanisme ; Ligne en pointillé ancien modèle cinétique.

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

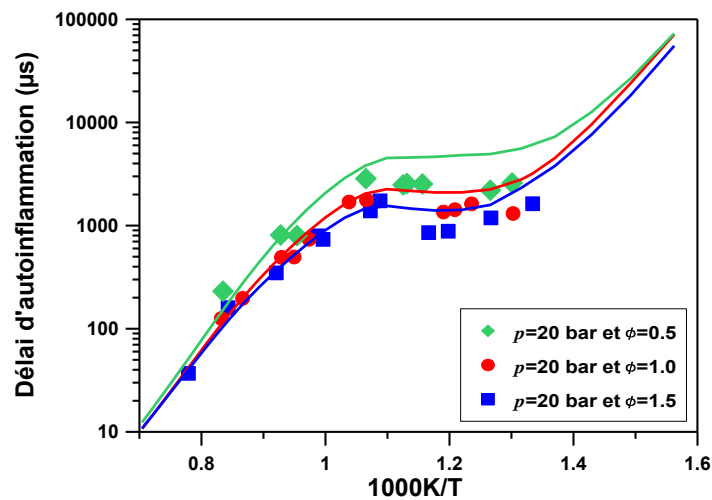


Figure 89. Confrontation entre les délais d'auto-inflammation simulés et mesurés pour l'oxydation de carburant modèle B30 dans l'air à 20 bar. Losange : données expérimentales pour  $\phi = 0.5$  ; Cercles: données expérimentales pour  $\phi = 1.0$  ; Carrés: données expérimentales à  $\phi = 1.5$ .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



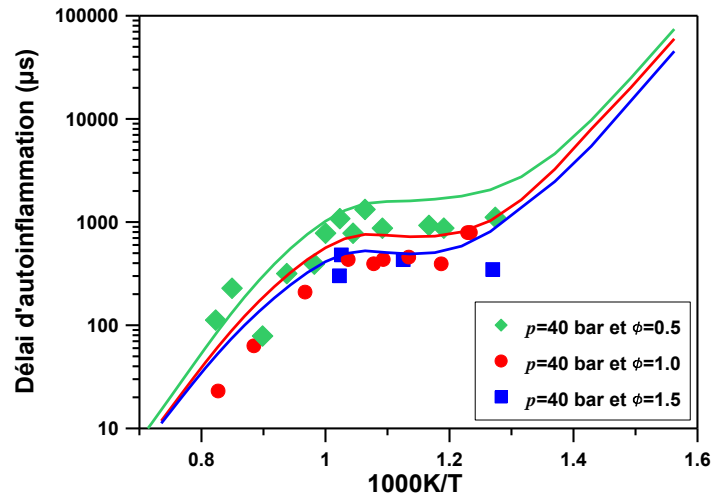


Figure 90. Confrontation entre les délais d'auto-inflammation simulés et mesurés pour l'oxydation de carburant modèle B30 dans l'air à 40 bar. Losange: données expérimentales pour  $\phi = 0.5$  ; Cercles: données expérimentales pour  $\phi = 1.0$  ; Carrés: données expérimentales à  $\phi = 1.5$ . Les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

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

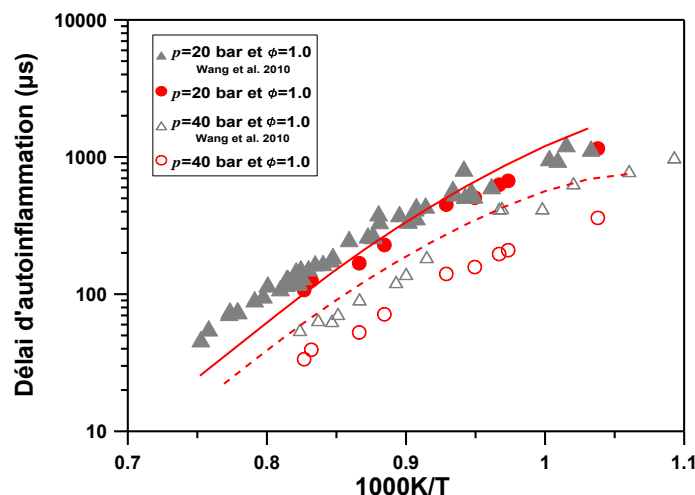


Figure 91. Confrontation entre délais d'auto-inflammation simulés et mesurés en tube à choc pour le carburant modèle de type B30-cercles (cette étude) et le carburant modèle de type gazole-triangles (Wang et al. 2010) à 20 bar (symboles pleins), à 40 bar (symboles vides). Lignes continues: prédictions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



Le principal résultat de l'analyse de flux réactionnel est la mise en évidence des interactions des radicaux primaires avec les composants du carburant modèle ou des espèces stables (Tableau 31). Le schéma réactionnel montre que les radicaux issus des premiers arrachements d'atomes d'hydrogène sont obtenus par métathèse avec OH $\cdot$ . En même temps et avec un moindre effet, les radicaux primaires sont impliqués dans les réactions d'arrachement de H. Ainsi, comme le montre la Figure 92, ces réactions impliquent des arrachements d'atomes d'hydrogène par le radical 1-naphthylméthyle ( $C_{10}H_{22} + C_{10}H_7CH_2\cdot \rightleftharpoons C_{10}H_{21}\cdot + C_{10}H_7CH_3$ ) et les radicaux alkylpéroxy ( $C_{10}H_7CH_3 + C_{10}H_{21}O_2\cdot \rightleftharpoons C_{10}H_7CH_2\cdot + C_{10}H_{21}O_2H$ ). De même on peut voir sur la Figure 92 qu'approximativement 31% du 1-méthyl-naphtalène est consommé par des réactions d'arrachement d'atomes d'hydrogène initiés par les différents radicaux décyloxy pour former du 1-naphthylméthyle. Environ 98% de ces radicaux alkylpéroxy proviennent du *n*-décane. On peut aussi observer que la plupart des réactions d'arrachement d'atomes d'hydrogène impliquent des radicaux OH. Par conséquent, 68% du 1-méthyl-naphtalène est consommé pour former le radical 1-naphthylméthyle stabilisée par résonance, 96% de *n*-décane forme des *n*-décyles et 90% de l'octanoate de méthyle forme les radicaux moXj ( $C_7H_{14}\cdot C(=O)OCH_3$ ). Tous ces radicaux primaires forment principalement des radicaux péroxy par fixation de O<sub>2</sub>: environ 98% de moXOO $\cdot$ , 100% de  $C_{10}H_7CH_2OO\cdot$  et environ 95% of  $C_{10}H_{21}OO\cdot$  sont formés de cette manière. Dans le cas particulier du *n*-décane, 5% de radicaux décyloxy produisent des oléfines via l'oxydation par O<sub>2</sub>. Tous ces radicaux péroxy s'isomérisent en radicaux alkylhydropéroxy correspondants qui à leur tour fixent à nouveau une molécule d'O<sub>2</sub>, comme on pourrait s'attendre dans cet intervalle de température.

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

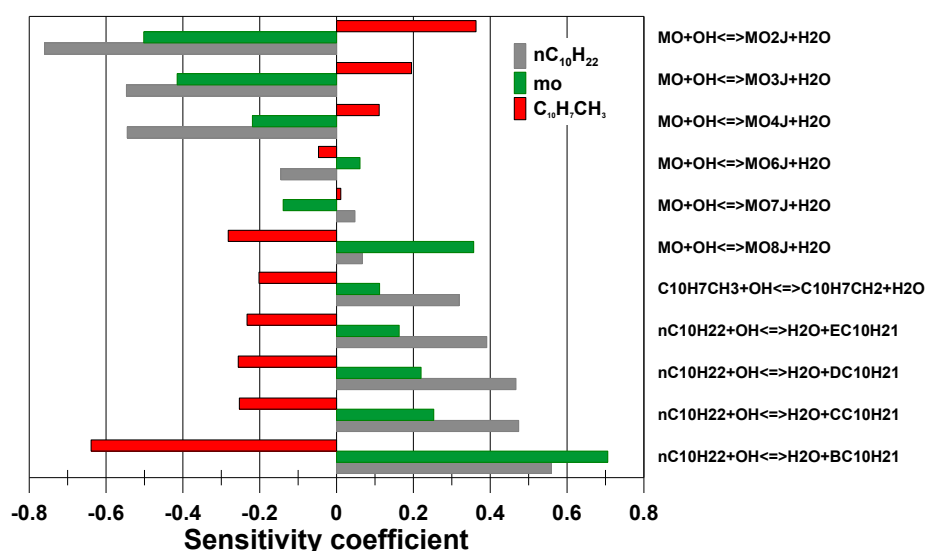
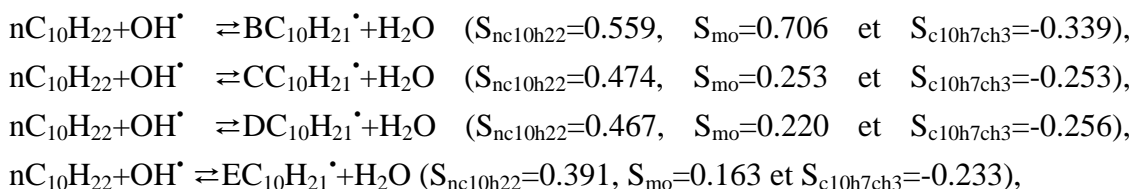


Figure 93. Analyse de sensibilité pour le carburant modèle B30 à 640 K,  $\phi = 1$ , 20 bar et une consommation de 0,15% du 1-méthylnaphtalène, de 0,011% du *n*-décane et de 0,01% de l'octanoate de méthyle.

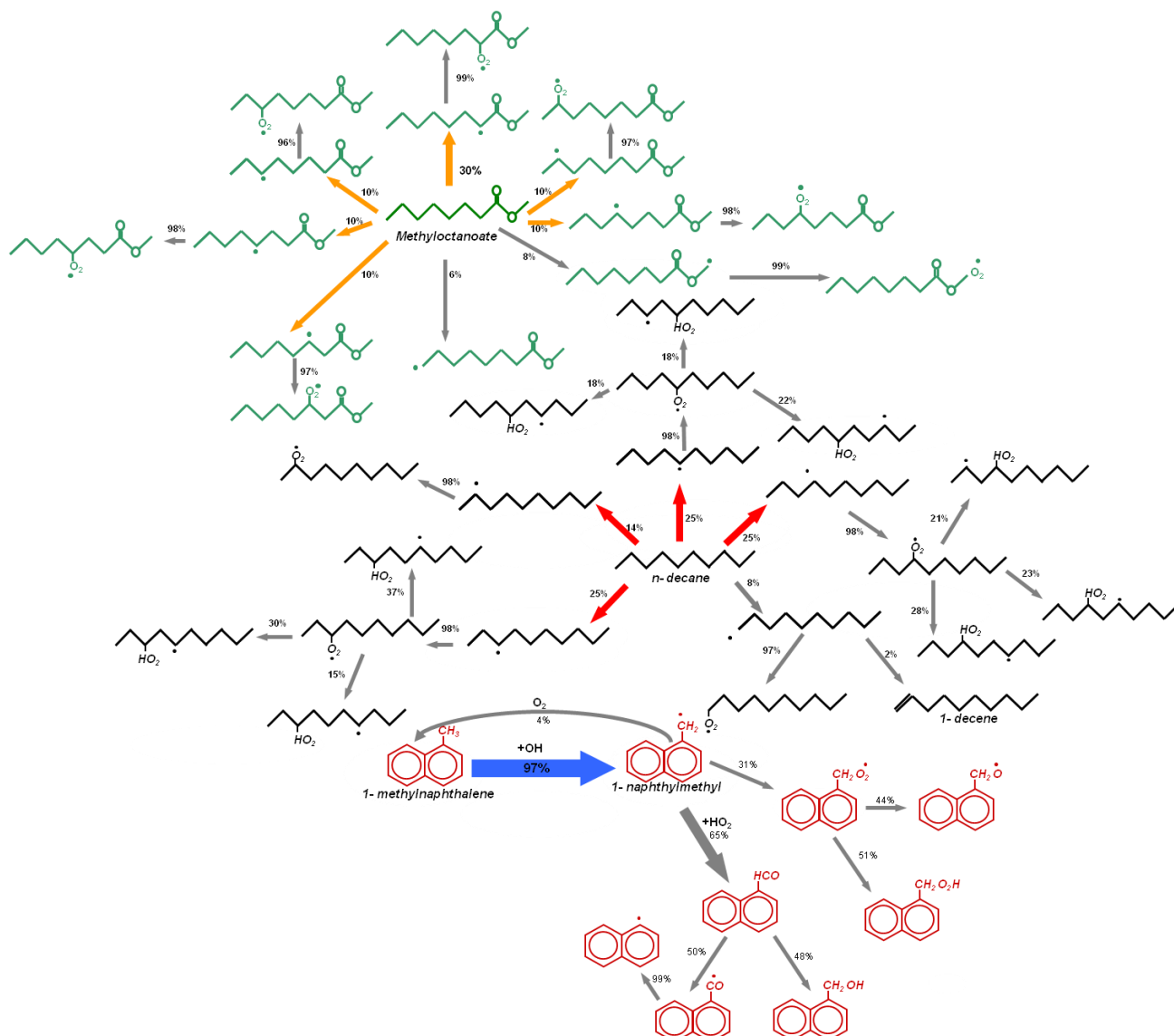
La Figure 93 présente les coefficients de sensibilité pour les constituants du B30 modèle dans des conditions identiques. D'après les simulations, les fractions de *n*-décane et d'octanoate de méthyle sont plus sensibles aux réactions de  $nC_{10}H_{22}$  avec  $OH^\bullet$



$C_{10}H_7CH_3$  et  $MO$  sont aussi consommés par réaction avec  $OH^\bullet$  via  $C_{10}H_7CH_3 + OH^\bullet \rightleftharpoons C_{10}H_7CH_2 + H_2O$  ( $S_{nC_{10}H_{22}} = 0.319$ ,  $S_{mo} = 0.112$ ;  $S_{C_{10}H_7CH_3} = -0.202$ ) et  $MO + OH^\bullet \rightleftharpoons MO8J + H_2O$  ( $S_{nC_{10}H_{22}} = 0.067$ ,  $S_{mo} = 0.357$ ;  $S_{C_{10}H_7CH_3} = -0.282$ ).

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

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



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

Au début du régime de coefficient négatif de température (conditions montrées dans la Figure 94), le carburant subit un arrachement d'atomes d'hydrogène par  $\text{OH}^\bullet$  et  $\text{O}^\bullet$  principalement, pour produire des radicaux primaires. Par exemple, la consommation du *n*-décane se fait via l'arrachement d'atomes d'hydrogène à 4,4% par  $\text{O}^\bullet$ , à 91,4% par  $\text{OH}^\bullet$  et à 1,2% par d'autres radicaux pour produire des radicaux décyles. En parallèle, le 1-méthyl-naphtalène produit principalement du 1-naphthylméthyle (97% via des réactions avec  $\text{OH}^\bullet$ ), suivi d'une formation d'alkylpéroxy et enfin par une isomérisation des radicaux alkylhydropéroxy. Les voies de consommations principales de l'octanoate de méthyle sont l'arrachement d'atomes d'hydrogène par  $\text{H}^\bullet$  (2%),  $\text{CH}_3\text{O}^\bullet$  (5%), et  $\text{OH}^\bullet$  (87.7%) pour donner des radicaux  $\text{moXj}^\bullet$ . A cette température, la plupart des radicaux primaires réagissent également en fixant  $\text{O}_2$ . Ainsi, environ 97% des radicaux décyles et  $\text{moXj}^\bullet$  forment un alkylpéroxy par fixation de  $\text{O}_2$ . Par contre, 31% du 1-naphthylméthyle réagit avec  $\text{O}_2$  pour produire  $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2\text{OO}^\bullet$  et 65% réagit avec  $\text{HO}_2$  pour produire le 1-naphthylaldéhyde. Finalement, les radicaux alkylpéroxy s'isomérisent en radicaux alkylhydropéroxy

avant de commencer le processus de ramification ( $\text{RO}_2\bullet \rightleftharpoons \text{QOOH}$  et  $\text{OOQO}_2\text{H}^\bullet \rightarrow \text{HOOQ}'\text{O}_2\text{H} \rightarrow 2\text{OH}$ ).

En ce qui concerne la consommation du carburant, seules les voies d'oxydation du du 1-méthylnaphtalène sont modifiées par les cinétiques mises à jour. La consommation du 1-méthylnaphtalène via  $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3 + \text{OH}^\bullet \rightleftharpoons \text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2^\bullet + \text{H}_2\text{O}$  représente 94% au lieu de 75% dans le mécanisme initial.

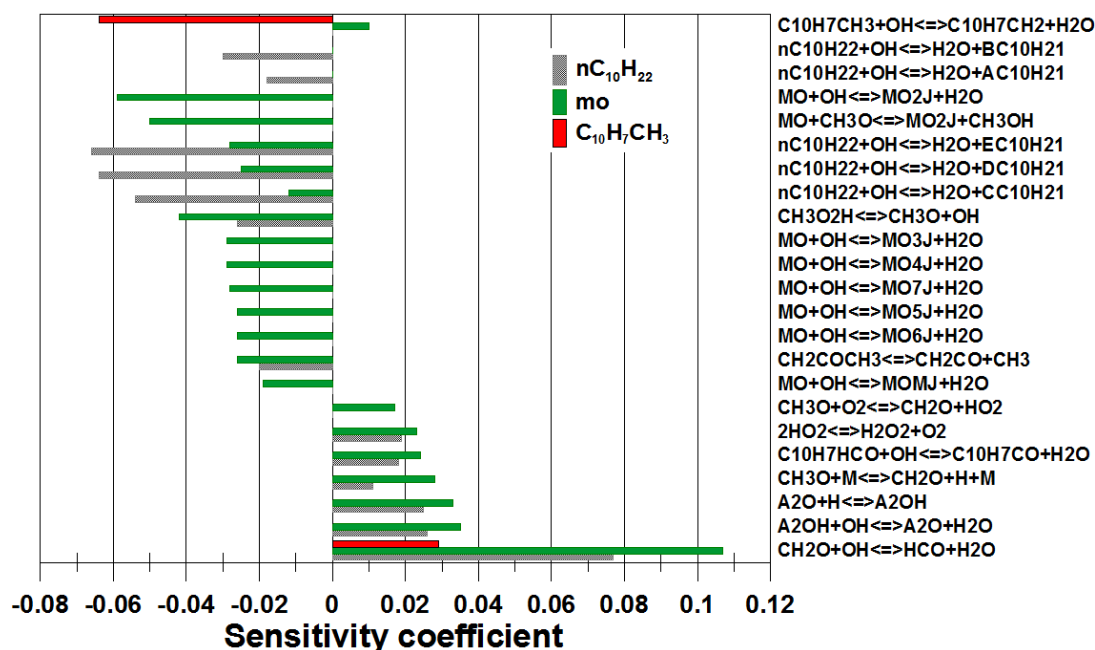


Figure 95. Analyse de sensibilité pour le carburant modèle B30 à 760 K,  $\phi = 1$ , 20 bar et pour une consommation du 38,98% du 1-méthylnaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 13,2% de l'octanoate de méthyle.

Les résultats des analyses de sensibilité de l'oxydation du carburant modèle B30 dans ces conditions sont présentées sur la Figure 95. Dans ce cas, la concentration du 1-méthylnaphtalène devient sensible à la réaction d'arrachement d'atomes d'hydrogène par  $\text{OH}^\bullet$  ( $\text{CH}_2\text{O}^\bullet + \text{OH}^\bullet \rightleftharpoons \text{HCO}^\bullet + \text{H}_2\text{O}$ ;  $S_{\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3} = 0.029$ ). Cette réaction réduit également la réactivité du *n*-décane et de l'octanoate de méthyle au début du NTC ( $S_{\text{nC}_{10}\text{H}_{22}} = 0.077$  and  $S_{\text{mo}} = 0.107$ ) car elle consomme les radicaux  $\text{OH}^\bullet$  au départ des constituants du carburant. D'après ces résultats, le 1-méthylnaphtalène, le *n*-décane, et l'octanoate de méthyle sont principalement consommés via des arrachements d'atomes d'hydrogène par  $\text{OH}^\bullet$  ( $S_{\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3} = -0.064$   $S_{\text{nC}_{10}\text{H}_{22}} = -0.066$  et  $S_{\text{mo}} = -0.059$ ) donnant les premiers radicaux primaires.





radicaux  $\text{moXj}$ . Par la suite, la plupart des radicaux primaires réagissent en fixant  $\text{O}_2$ : entre 81 et 97% de radicaux  $\text{moXj}$  produisent  $\text{moXoo}$  et près de 96% des décyles produisent des décyloxy. Le 1-naphthylméthyle a le même comportement qu'avant et seulement 25% réagit avec  $\text{O}_2$  pour produire  $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_2\text{OO}^\bullet$  et 71% réagit avec  $\text{HO}_2^\bullet$  pour produire le 1-naphtaldéhyde.

En ce qui concerne la production de  $\text{OH}^\bullet$  à 910K, comme avant, une augmentation de seulement 1% a été observée avec le mécanisme modifié par rapport au mécanisme initial. Les principales réactions responsables de la production de  $\text{OH}^\bullet$  dans le régime NTC sont :  $2\text{OH}^\bullet (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 (+\text{M})$ ,  $\text{CH}_3^\bullet + \text{HO}_2^\bullet \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O}^\bullet + \text{OH}^\bullet$ , et  $\text{QOOH} \rightleftharpoons \text{QO}^\bullet + \text{OH}^\bullet$ .

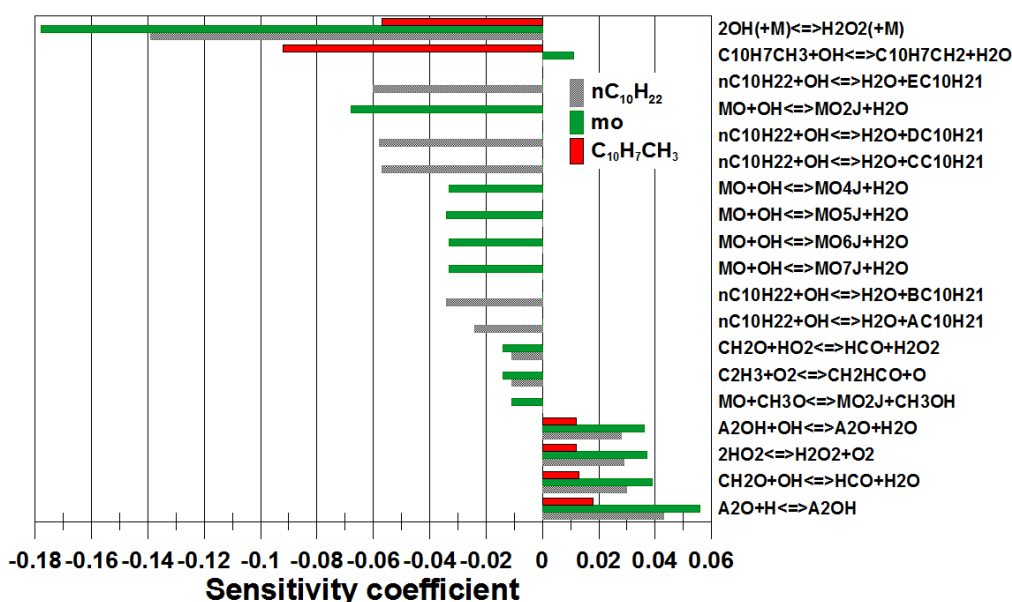


Figure 97. Analyse de sensibilité pour le B30 modèle à 910 K,  $\phi = 1$ , 20 bar et une consommation de 21,69% du 1-méthylaphtalène, de 76,09% du *n*-décane et de 64,14% de l'octanoate de méthyle.

La Figure 97 montre les coefficients de sensibilité des constituants du carburant dans les mêmes conditions à la fin du régime NTC. Ici, on peut également observer que les métathèses par OH produisent des radicaux primaires. Cependant, la consommation du carburant est plus sensible à la réaction impliquant la décomposition de  $\text{H}_2\text{O}_2$  pour générer deux radicaux OH ( $S_{\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3} = -0.139$ ,  $S_{\text{nC}_{10}\text{H}_{22}} = -0.057$  et  $S_{\text{mo}} = -0.178$ ). Inversement, la réaction de formation de  $\text{A}_2\text{OH}$  via  $\text{A}_2\text{O}^\bullet + \text{H}^\bullet \rightleftharpoons \text{A}_2\text{OH}$  est la réaction la plus inhibitrice ( $S_{\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CH}_3} = 0.043$ ,  $S_{\text{nC}_{10}\text{H}_{22}} = 0.018$ , and  $S_{\text{mo}} = 0.056$ ).

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



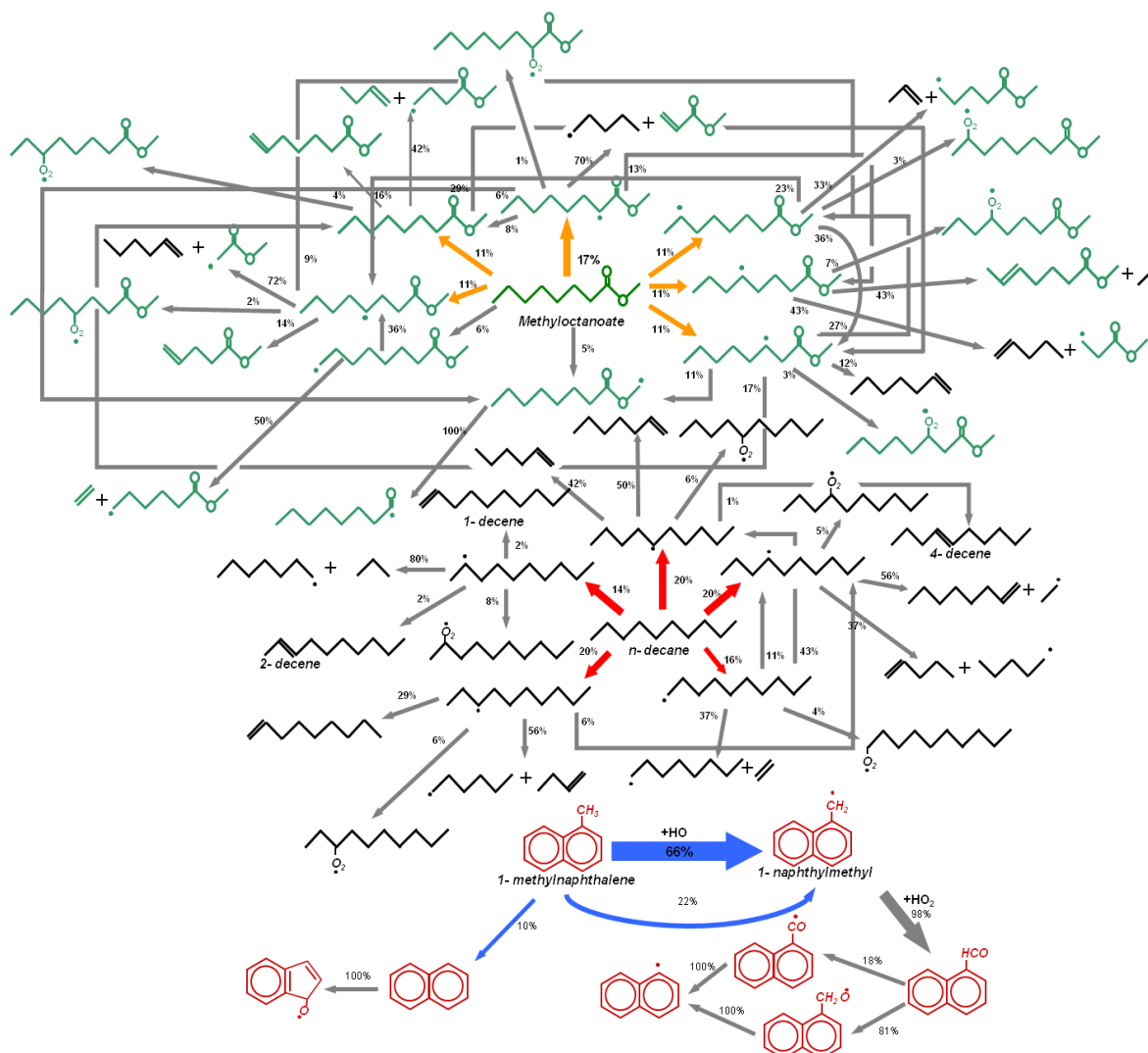
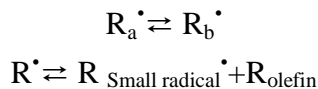


Figure 98. Analyse des principales voies réactionnelles lors de l'oxydation du B30 modèle à 1210 K, 20 bar,  $\phi=1$  et pour une consommation de 19,08% du 1-méthylnaphtalène, de 45,74% du *n*-décane et de 60,71% de l'octanoate de méthyle.

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

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



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

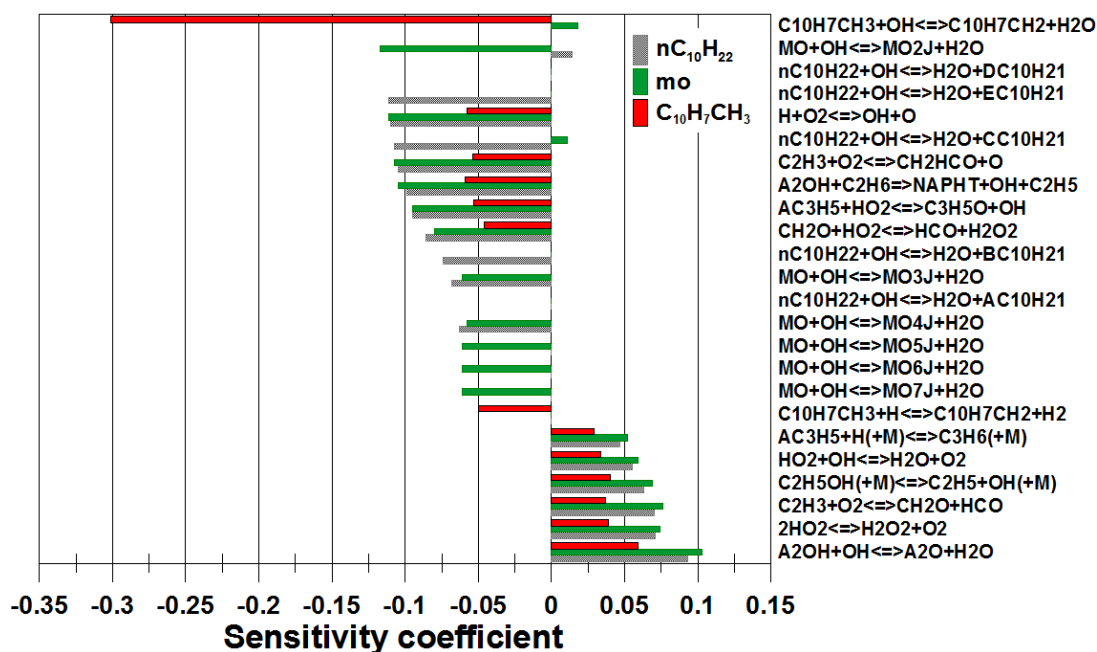


Figure 99. Analyse de sensibilité pour le B30 modèle à 1210 K,  $\phi = 1$ , 20 bar et pour une consommation de 19,08% du 1-méthylnaphtalène, de 45,74% du *n*-décane et de 60,71% de l'octanoate de méthyle.

La Figure 99 présente les résultats des analyses de sensibilité de l'oxydation du carburant modèle B30. Comme on pouvait s'y attendre, les analyses de sensibilité à 1210K n'ont pas révélé un comportement inhabituel de la chimie à haute température. Le système est principalement sensible aux cinétiques du sous-mécanisme C<sub>0</sub>-C<sub>1</sub>, c'est-à-dire aux réactions :  $H^\bullet + O_2 \rightleftharpoons OH^\bullet + O$ ,  $HO_2^\bullet + OH^\bullet \rightleftharpoons H_2O + O_2$ , et  $CH_2O^\bullet + HO_2^\bullet \rightleftharpoons HCO^\bullet + H_2O_2$ .

## Conclusion

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

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

## ***Chapitre 5***

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

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

#### **5.1 Régimes de propagation de flamme.**

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

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

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

#### **5.2 Structure d'une flamme de pré-mélange**

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

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

### 5.2.1 Théorie thermique : Loi de Mallard et Le Châtelier

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

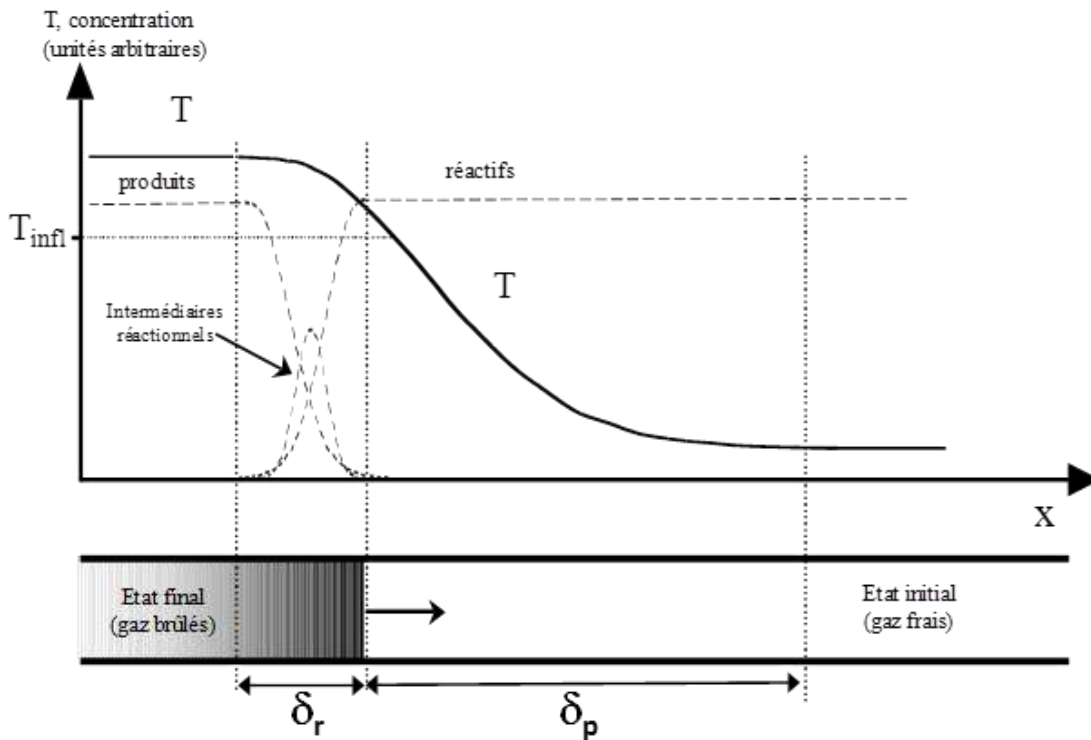


Figure 100. Structure de la flamme laminaire pré-mélangée.

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

$$S_{\ell}^{\circ} \approx \sqrt{\alpha \cdot \omega^{\bullet}} \quad (1)$$

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

$\alpha = \frac{\lambda}{\rho \cdot C_p}$  est la diffusivité thermique,

$\lambda$  est la conductivité thermique,

$\rho$  est la densité

$C_p$  est la capacité calorifique.

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

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

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

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

$$\text{Pr} = \frac{\mu \cdot C_p}{\lambda} = 1 \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D} = 1 \quad \text{Le} = \frac{\alpha}{D} = \frac{A}{B}$$

où  $\mu$  est la viscosité dynamique

$D$  le coefficient de diffusion massique

$\alpha$  la diffusivité thermique

$n_r$  et  $n_p$  sont les quantités de réactifs et de produits

$\lambda$  est la conductibilité thermique

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

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

$T$  et  $\rho$  la température et la masse volumique

$n$  représente l'ordre de la réaction bilan

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

### 5.3 Vitesse fondamentale de flamme

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

Plusieurs dispositifs expérimentaux permettent l'étude de flammes laminaires :

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

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

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

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

Ceci est appelé l'effet piston et est caractérisé par le taux d'expansion qu'il est possible de déterminer thermodynamiquement pour un mélange donné dans des conditions

données :  $\sigma = \frac{\rho_b}{\rho_u}$  avec  $\rho_b$  la masse volumique des gaz brûlés et  $\rho_u$  la masse volumique des gaz frais. Dans le cas d'une flamme infiniment mince en propagation sphérique, la relation générale s'écrit :

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

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

## 5.4 Vitesse fondamentale de flamme à étirement nul

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

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

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

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

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

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

$R$  est le rayon de courbure

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

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

Pour une propagation de la flamme sphérique :

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

Pour un étirement faible, la théorie asymptotique des flammes prévoit une évolution linéaire de la vitesse fondamentale de flamme  $S_\ell$  avec l'étirement permettant ainsi de déduire la vitesse fondamentale de flamme à étirement nul  $S_\ell^0$  :

$$S_\ell^0 - S_\ell = L' \cdot K \quad (8)$$

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

$$V_s^0 - V_s = L \cdot K \quad \text{avec } L = \sigma \times L'$$

pour une propagation sphérique :



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

Deux méthodes sont possibles pour la dérivation de  $V_s^\circ$  à partir de l'évolution du rayon de la flamme en fonction du temps :

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

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

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

2. En intégrant directement l'équation :

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

Ce qui donne par intégration :

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

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

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

## 5.5 Influence des conditions initiales sur la propagation des flammes

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

### 5.5.1 Pression initiale

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

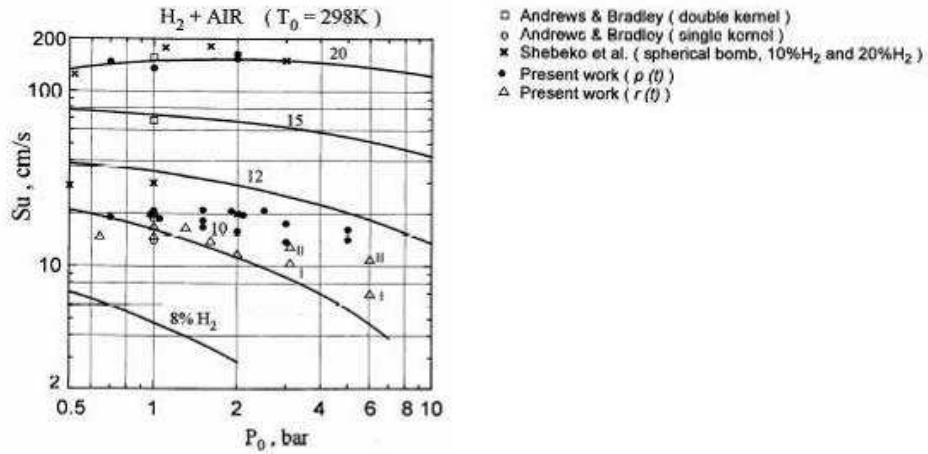


Figure 101. Influence de la pression initiale sur la vitesse fondamentale de flamme à 298 K. Gelfand 2000.

### 5.5.2 Température initiale

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

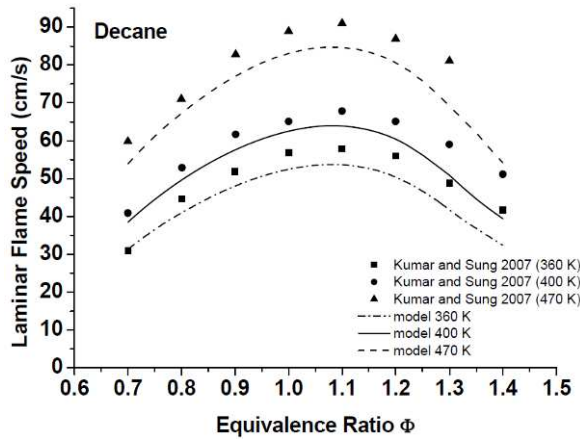


Figure 102. Influence de la température initiale sur la vitesse de flamme laminaire. Kumar et al. 2007; Kumar et al. 2007.

### 5.5.3 Influence du rapport d'équivalence

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

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

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

#### 5.5.4 Influence de la dilution

La vitesse fondamentale de flamme diminue avec le taux de dilution du mélange. De plus, le diluant joue un rôle important sur  $S_L$ , soit au travers de la température de flamme, soit au travers de la diffusivité thermique. Ainsi, Ar et  $N_2$  ont des diffusivités thermiques proches mais la capacité calorifique de  $N_2$  est légèrement plus grande que celle de Ar, alors  $S_L(\text{Ar}) > S_L(\text{N}_2)$ . Tandis que pour des capacités calorifiques identiques, comme c'est le cas pour les deux gaz nobles Ar et He, la différence en diffusivité thermique aura des effets sur la  $S_L$  : diffusivité thermique de He étant plus élevée que celle de Ar,  $S_L(\text{He}) > S_L(\text{Ar})$ , Figure 103.

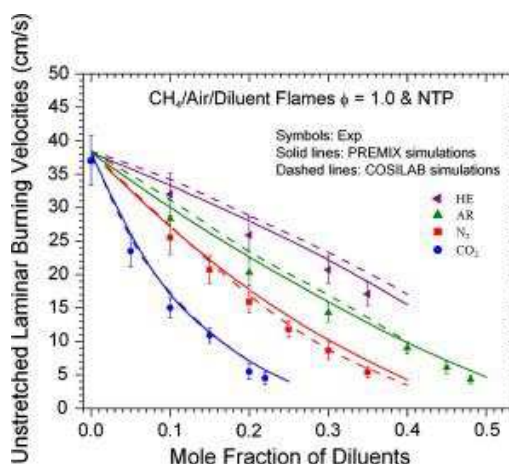


Figure 103. Influence du diluant initial sur la vitesse de flamme laminaire. Qiao *et al.* 2008.

#### 5.5.5 Influence de la nature du combustible

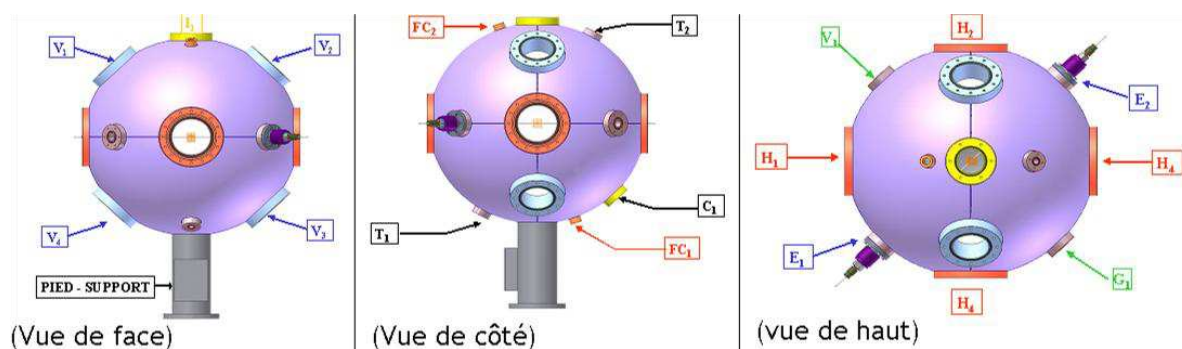
La vitesse fondamentale de flamme dépend aussi de la structure chimique du carburant. Pour des hydrocarbures linéaires, la vitesse fondamentale de flamme augmente avec la longueur de chaîne ; tandis que pour les hydrocarbures ramifiés, la vitesse fondamentale de flamme diminue avec les ramifications. Egalement, la nature des liaisons joue un rôle important : les insaturations augmentent la vitesse laminaire de flamme.

Les peroxydes, aldéhydes et éthers possèdent des vitesses fondamentales de flamme élevées, spécialement lorsque les composés sont cycliques. Les corrélations sont plus complexes pour des mélanges de plusieurs hydrocarbures.

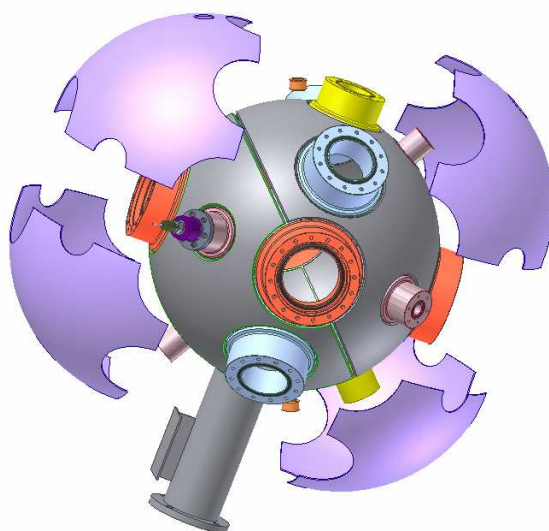
## 5.6 La Bombe Sphérique SF2

La bombe sphérique SF2 (Spherical Flame Facility) du laboratoire ICARE est le dispositif utilisé dans la troisième partie de cette étude pour les mesures de vitesse fondamentale de flamme. Ce dispositif permet de déterminer la vitesse normale de propagation ou de combustion de flamme de carburants en phase gazeuse, grâce à une source faible d'énergie qui démarre la combustion au centre de l'enceinte. Cette propagation aura lieu dans un milieu isolé, contrôlé et libre d'obstacles.

L'enceinte sphérique est constituée par deux sphères concentriques en acier inoxydable Z2CN18-10 de 476mm et 500mm chacune. Entre les deux sphères la circulation d'une huile chaude maintient la température du système. Les pressions des opérations, pour la sphère interne, peuvent varier entre 0 bar et 50bar et sa température d'opération peut varier jusqu'à 206°C. La Figure 104 montre en détail les éléments qui constituent la bombe sphérique de notre étude.



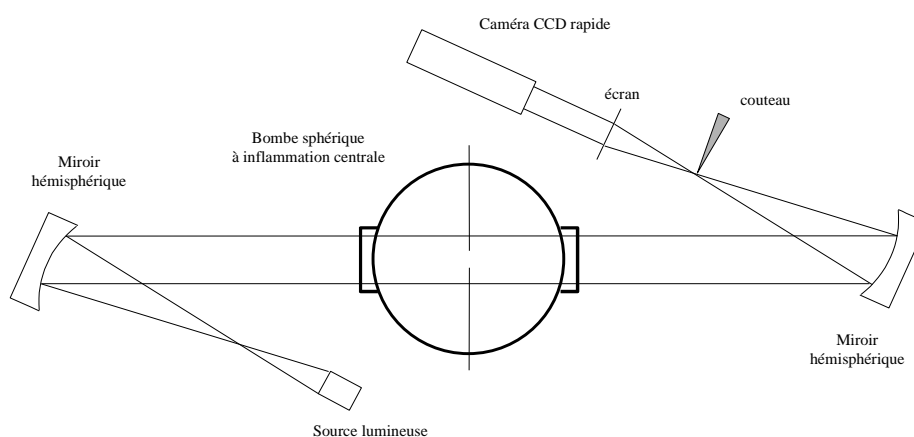
**Figure 104.** Différentes vues de la bombe sphérique utilisée durant cette étude : H<sub>1</sub> et H<sub>4</sub> hublots de visualisation de la flamme, E<sub>1</sub> et E<sub>2</sub> électrodes en tungstène, C<sub>1</sub> le capteur de pression, T<sub>1</sub> thermocouple, G<sub>1</sub> système d'introduction des gaz et FC<sub>1</sub> et FC<sub>2</sub> la circulation du fluide chauffant.



**Figure 105.** Vue de la seconde enveloppe de la bombe sphérique.

### 5.6.1 Principe de fonctionnement

La méthode de la bombe sphérique est associée à la technique de strioscopie laser (Figure 106) qui permet de visualiser la propagation de la flamme, à l'aide d'une caméra rapide (100 000 images/s). Ce dispositif permet également d'observer les instabilités du front de flamme et sa limite de propagation. La source lumineuse est focalisée grâce à une lentille bi-convergente de 200 mm. Le faisceau réfléchi sur le premier miroir traverse la bombe à travers les hublots de sections circulaires en quartz avant de trouver un second miroir hémisphérique de même focale que le premier. Les images sont projetées sur un écran placé entre la point focale image et la caméra. Les images sont projetées sur un écran placé entre la point focale image et la caméra.



**Figure 106. Dispositif de visualisation de la flamme par strioscopie laser.**

La bombe sphérique est liée à 2 pompes à vide primaires de 20 m<sup>3</sup>/h chacune. Pour son remplissage, lors de cette étude, les mélanges ont été préparés au sein du dispositif par la méthode des pressions partielles. L'hydrocarbure est vaporisé à travers un septum pendant que l'air sec est introduit par le système d'introduction des gaz. La pression est mesurée grâce aux manomètres capacitifs BARATRON -MKS (0-100 et 0 - 1 000 Torr), et par un capteur piézo-résistif 4075A10V64 - Kistler (0 - 10 bar).

Deux électrodes en tungstène reliées à un système de décharge de haute tension déclenchent l'inflammation au centre de la sphère, après introduction du mélange combustible (Figure 107). Les gaz brûlés de cette combustion adoptent une forme de propagation sphérique. La création de l'étincelle induit l'envoi d'un signal TTL permettant la synchronisation de l'acquisition vidéo et des enregistrements de capteur aux parois. A la fin de la combustion, le système est vidé grâce aux deux pompes de 20 m<sup>3</sup>/h chacune.

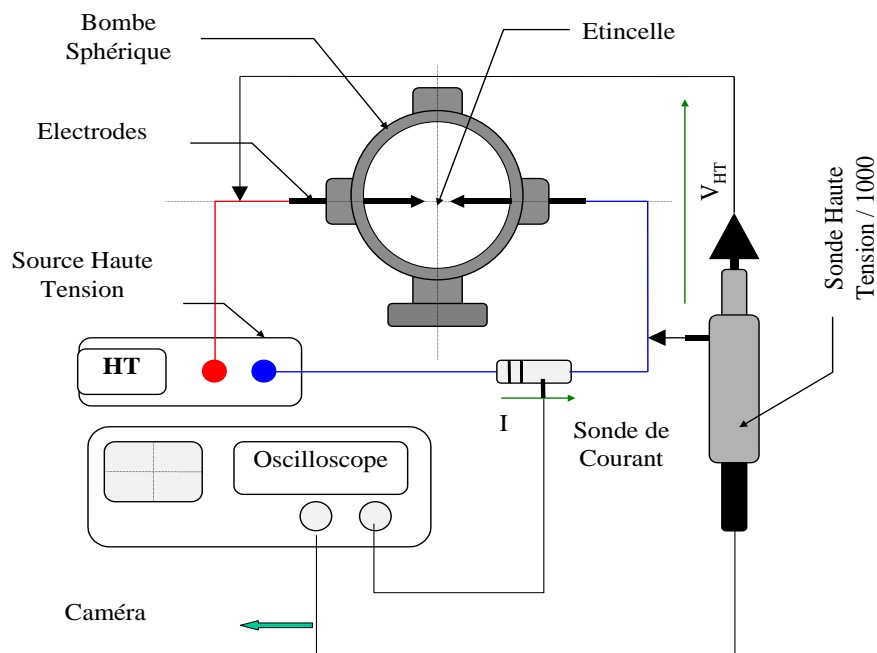


Figure 107. Schéma du dispositif d'inflammation des mélanges.

## 5.7 Méthodologie

Le déclenchement de l'étincelle au centre de la chambre active l'acquisition des images (512 x 512 pixels) à l'aide d'une caméra rapide à 6000 images/s via un signal TTL égal à zéro (Figure 108). La propagation sphérique se déroule à volume constant et le gaz dans lequel la flamme se déplace est lui à pression variable. Les images, tout au long de l'expérience, doivent être prises au début de la propagation de la flamme, quand la combustion est isobare et quasi isotherme.

L'évolution du rayon de la flamme en fonction du temps peut être extraite des images, et la vitesse de la flamme spatiale  $V_{SL}$  peut alors être déduite au travers de la pente de cette évolution, Figure 109.

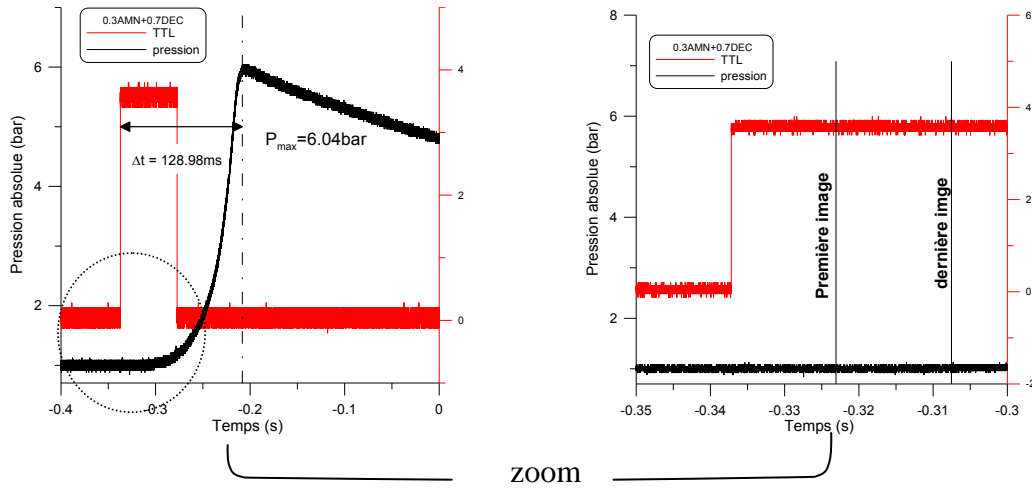


Figure 108. Exemple d'évolution de la pression durant l'acquisition d'une  $S_f$ . Le combustible est le gazole modèle.

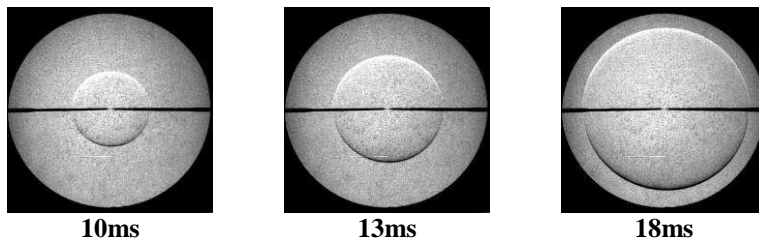
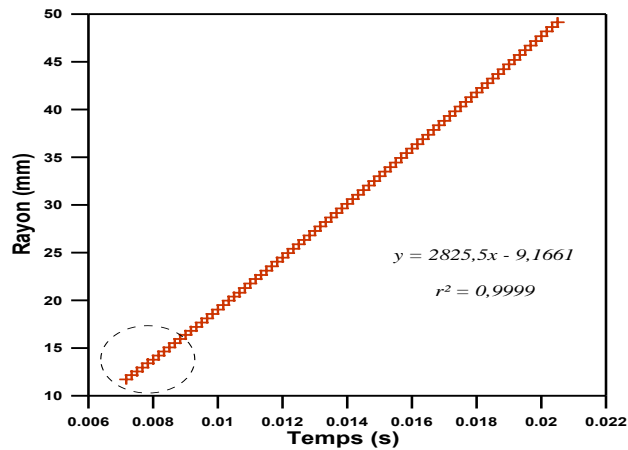
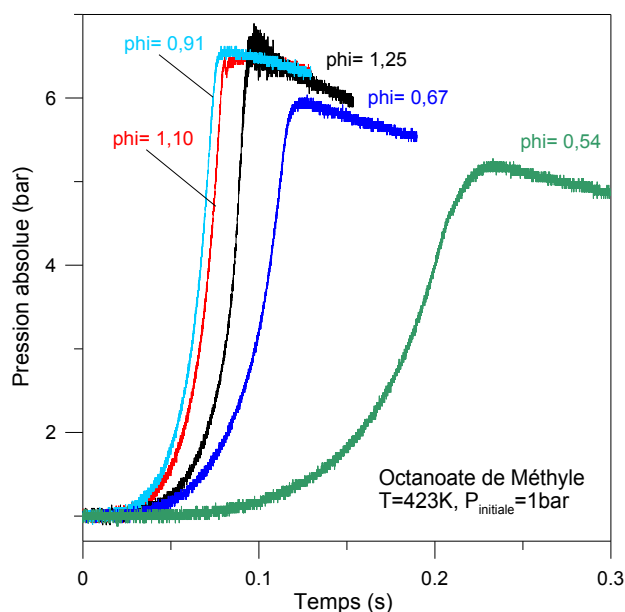


Figure 109. Evolution du rayon de flamme en fonction du temps.

L'évolution de la pression est enregistrée pour chaque carburant à chaque richesse grâce à un oscilloscope. La Figure 110 montre des profils de pressions pour des expériences à différents rapports d'équivalence de l'octanoate de méthyle à 423 K et 1 bar de pression initiale. Comme le montre la figure, les pics de pression sont plus instables (oscillation de la pression) pour des mélanges riches en reflétant la présence de cellules au sein de la flamme.



**Figure 110.** Evolution de la pression en fonction du temps de l'octanoate de méthyle pour un intervalle de rapports d'équivalence de 0,54 à 1,25.

Les expériences réalisées avec ce dispositif ont permis de suivre l'évolution de la vitesse fondamentale de flamme entre les limites inférieure et supérieure d'inflammabilité. Ces expériences ont été réalisées uniquement pour les carburants modèles représentatifs du gazole (70% mol de *n*-décane et 30% mol de 1-méthylnaphtalène) et du B30 (49% mol de *n*-décane, 21% mol de 1-méthylnaphtalène et 30% méthyle octanoate).

Les vitesses ont été mesurées pour une large gamme de richesse, à partir de la limite inférieure d'inflammation (à une condition initiale de 423 K et 1 bar), jusqu'à l'apparition des instabilités de flamme, c'est-à-dire, jusqu'à l'apparition de flammes cellulaires difficilement exploitables.

La détermination de la vitesse spatiale à étirement nul peut être obtenue selon deux méthodes différentes :

- Par approximation du rayon selon une fonction polynomiale où la dérivée de ce rayon en fonction du temps permet d'accéder à la fois à la vitesse spatiale étirée et à l'étirement. Ainsi, en traçant la vitesse spatiale étirée en fonction de l'étirement et par extrapolation à  $K=0$  permet d'en déduire  $VS^\circ$ .  
Par intégration de la relation (11).

Les deux  $VS^\circ$  déduites des deux méthodes ont été tracées en fonction du rapport d'équivalence sur la Figure 111. Comme on peut le voir les deux méthodes donnent des valeurs comparables aux erreurs expérimentales près ( $\pm 5\%$ ).



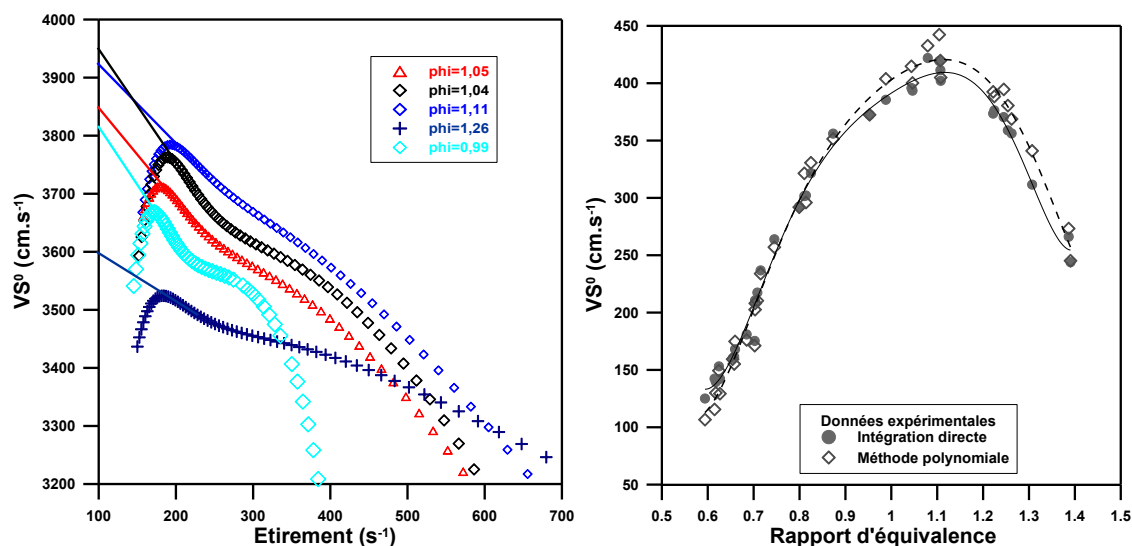


Figure 111. Evolution de la vitesse spatiale de flamme du carburant modèle type gazole en fonction de l'étirement pour quelques rapports d'équivalence.

Par la suite l'intégration directe est privilégiée, car elle permet de réduire considérablement les erreurs sur les longueurs de Markstein (Lamoureux *et al.* 2003).

## 5.8 Résultats expérimentaux

### 5.8.1 Conditions expérimentales

Plusieurs séries d'expériences en bombe sphérique ont été réalisées. Tous les hydrocarbures utilisés ont été obtenus auprès de *Sigma-Aldrich* : le *n*-décane (CAS 124-18-5, >99% de pureté), le 1-méthyl-naphtalène (CAS 90-12-0, >95% de pureté) et l'octanoate de méthyle (CAS 111-11-5, pureté >99%). Les conditions expérimentales sont présentées dans le tableau suivant.

Tableau 32. Conditions initiales étudiées au cours de ce travail.

Carburant	$P_{initiale}$ (bar)	$T_{Initiale}$ (K)	$X_{Fuel}$	$X_{O_2}$	$X_{N_2}$	$\phi$
<b>IDEA-fuel</b>			0,0064			0,45
70% <i>n</i> -décane + 30% 1-méthyl-naphtalène	1 et 4	423	à 0,0158	0,209 à 0,203	0,784 à 0,765	à 2,22
<b>B30</b>			0,0082			0,56
49% <i>n</i> -décane + 21% 1-méthyl-naphtalène + 30% octanoate de méthyle	1 et 4	423	à 0,0219	0,208 à 0,205	0,783 à 0,772	à 1,51

### 5.8.5 Carburant type IDEA-fuel : 70%mol *n*-décane-30%mol 1-méthylnaphtalène

#### a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar

Un mélange binaire correspondant au carburant modèle type gazole a été étudié (70% de *n*-décane et 30% d'1-méthylnaphtalène en mol). La combustion de ce mélange a été étudiée dans l'air. La température initiale a été fixée à 423 K. Pour ce mélange, les mesures ont été réalisées pour deux pressions initiales différentes : 1 et 4 bar. Les paramètres expérimentaux de chaque expérience sont présentés en détail sur le Tableau 33.

**Tableau 33. Résultats expérimentaux pour le gazole modèle à 1 bar et 423 K.  $L'$  : Longueur de Markstein,  $T_F$  : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore).**

$\varphi$	$\Sigma$	$SL_0$ (cm/s)	$L'$ (mm)	$P_{max}$ (bar)	$T_F$ à $P_{cste}$ (K)	PAICC (bar)
0,59	4,41	28,390	1,106	–	1810	5,295
0,61	4,50	31,664	0,843	–	1851	5,392
0,62	4,52	30,857	0,894	5,048	1855	5,418
0,62	4,54	33,706	0,975	–	1867	5,447
0,63	4,57	31,160	0,638	5,040	1872	5,473
0,65	4,68	34,195	0,630	5,123	1921	5,611
0,66	4,70	34,378	0,554	5,293	1928	5,612
0,66	4,72	35,616	0,560	5,299	1931	5,629
0,68	4,83	37,444	0,560	5,433	1975	5,770
0,70	4,92	35,628	0,734	5,239	2004	5,853
0,70	4,92	42,879	0,372	5,631	2006	5,844
0,70	4,92	42,518	0,495	5,639	2007	5,868
0,71	4,93	44,142	0,487	5,623	2016	5,849
0,72	4,97	47,683	0,547	5,689	2026	5,915
0,74	5,10	51,790	0,408	5,775	2075	6,024
0,80	5,31	55,100	0,386	6,075	2158	6,255
0,81	5,36	56,287	0,309	6,043	2173	6,284
0,81	5,37	56,230	0,384	6,098	2178	6,297
0,82	5,42	59,372	0,351	6,082	2192	6,317
0,87	5,56	64,033	0,168	6,220	2253	6,485
0,95	5,83	63,920	0,216	6,417	2325	6,736
0,99	5,90	65,384	0,200	6,439	2348	6,822
1,04	5,98	66,154	0,188	6,539	2368	6,931
1,05	5,99	65,743	0,203	6,495	2369	6,936
1,08	6,04	69,912	0,239	6,643	2370	6,995
1,10	6,05	69,267	0,222	6,655	2366	7,041
1,11	6,04	68,095	0,236	6,615	2367	7,049
1,11	6,04	66,548	0,196	6,621	2366	7,036
1,22	6,05	61,767	0,086	6,705	2307	7,148
1,22	6,03	62,373	0,133	–	2305	7,133
1,24	6,04	61,377	0,107	6,770	2291	7,163

1,25	6,01	59,731	0,119	6,704	2285	7,125
1,26	6,02	59,148	0,060	6,480	2278	7,156
1,31	5,99	52,068	-0,008	6,721	2246	7,144
1,39	5,93	44,897	-0,075	6,732	2188	7,123
1,39	5,91	41,255	-0,145	6,805	2184	7,113
1,70	5,66	16,002	-0,441	6,377	1962	6,890
2,22	5,19	6,900	-0,600	4,012	1614	6,394

A une pression initiale de 1 bar, l'inflammation du mélange combustible, avec une propagation totale, a été obtenue pour des rapports d'équivalence compris entre 0,59 et 2,22. Avec le système d'inflammation utilisé, aucune flamme n'a pu être initiée pour des rapports d'équivalence inférieurs à 0,45.

A partir des expériences réalisées avec ce mélange, nous avons tracé l'évolution de la vitesse spatiale en fonction de la richesse (Figure 112-a) ainsi que celle de la vitesse fondamentale de flamme (Figure 112-c). Nous notons une évolution de ces vitesses selon une forme en cloche. Elles présentent des maxima pour un rapport d'équivalence d'environ 1,08 et qui sont respectivement de  $415 \text{ cm.s}^{-1}$  et  $69,9 \text{ cm.s}^{-1}$ . Sur la même figure, on peut également observer les longueurs de Markstein extraites en fonction du rapport d'équivalence (Figure 112 b et d). Les deux types de longueurs suivant la même évolution avec l'accroissement du rapport d'équivalence, on note une décroissance à mesure que ce dernier augmente avec un changement de signe pour une richesse critique de 1,31.

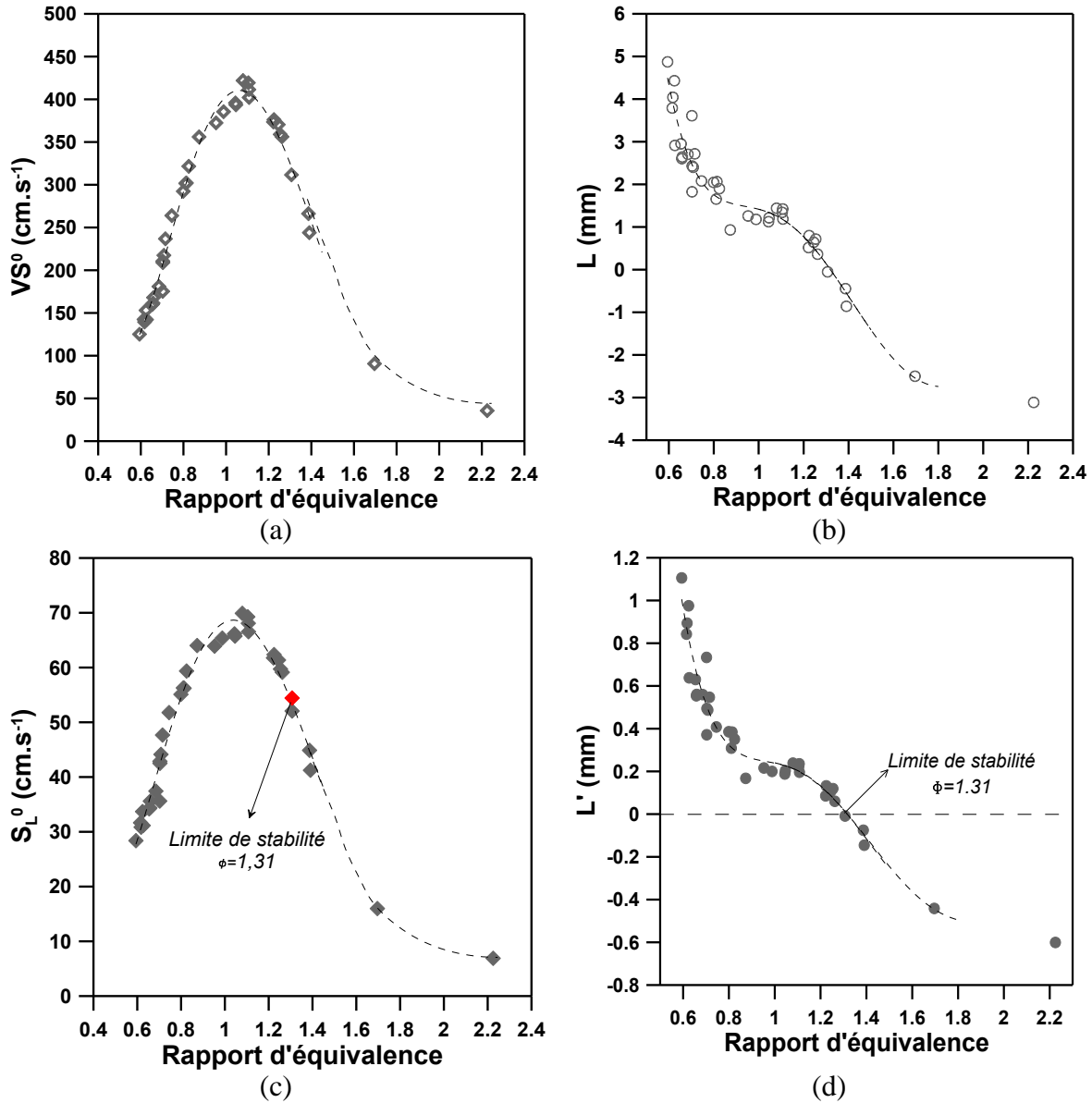


Figure 112. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle gazole / air à 423 K et 1 bar de pression initiale.

Pour un rapport d'équivalence égale à 0,59, la flamme initiée au centre de la bombe se propage à la même vitesse dans toutes les directions donnant naissance ainsi à une flamme sphérique. De plus, elle présente un front bien lisse sans aucun plissement comme on peut le voir sur la Figure 113.

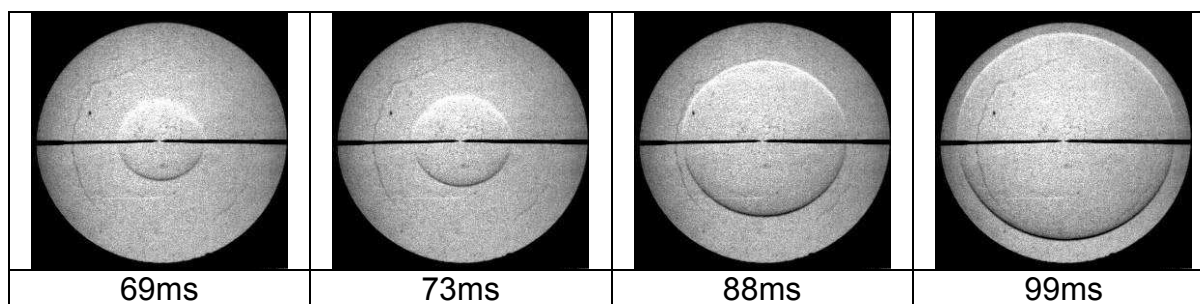


Figure 113. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 0,59.

Le même type de flamme est obtenu lorsque le mélange combustible est enrichi en combustible jusqu'à une richesse limite de 1,39. Au-dessus de cette richesse, le plissement de la flamme apparaît comme on peut le voir sur la Figure 114.

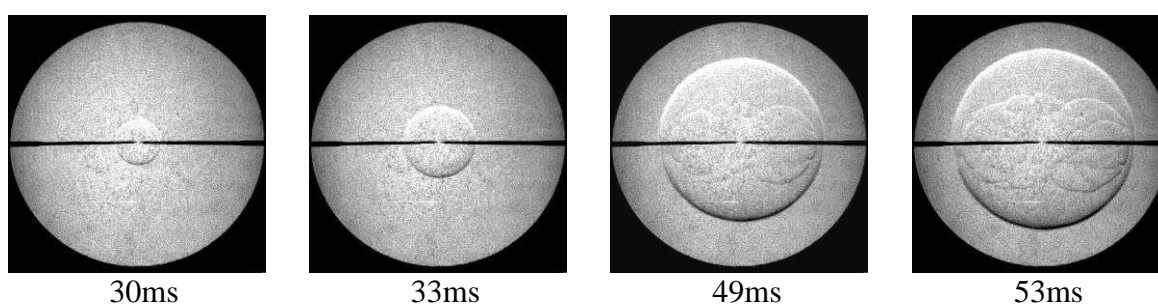


Figure 114. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 1,70.

Ce plissement est d'autant plus important que la richesse est grande, de même, le plissement de la flamme se produira pour des rayons de flamme qui seront d'autant plus petits que la richesse sera élevée. Enfin, lorsque l'on se rapproche de la limite d'inflammabilité supérieure, nous notons une propagation de la flamme qui se fait à une vitesse plus lente dans la direction descendante que dans la direction ascendante en raison des forces de flottabilité qui deviennent plus importantes que les forces inertielles. Ce phénomène est illustré, Figure 115, dans le cas du mélange (0,7/0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène) pour une richesse de 2,22.

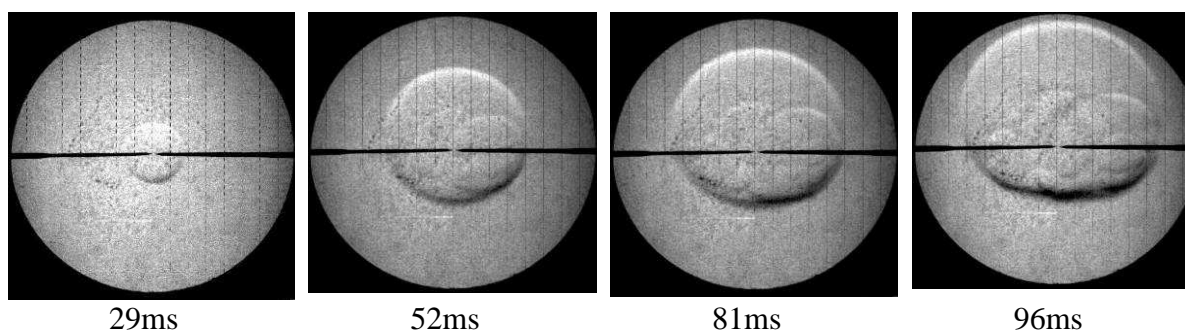


Figure 115. Images de propagation de flamme du gazole modèle à un rapport d'équivalence de 2,22.

## b) Résultats obtenus à une pression initiale de 4 bar.

Des essais ont été réalisés pour ce même mélange avec une pression initiale plus élevée, soit 4 bar, tout en maintenant la température initiale à 423 K. Les détails des conditions expérimentales se trouvent sur le Tableau 34 ci-dessous.

**Tableau 34. Résultats expérimentaux pour le gazole modèle à 4 bar et 423 K.  $L'$  : Longueur de Markstein,  $T_F$  : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore).**

$\phi$	$\Sigma$	$S_L^0$ (cm/s)	$L'$ (mm)	$P_{max}$ (bar)	$T_F$ (K)	$P_{AICC}$ (bar)
0,59	4,367	16,32	1,982	19,588	1798	21,01
0,62	4,506	17,84	1,054	20,815	1853	21,60
0,62	4,537	16,39	0,842	20,812	1865	21,80
0,62	4,541	17,82	1,201	19,305	1867	21,82
0,64	4,624	23,24	0,864	-	1899	22,19
0,66	4,726	22,50	0,870	21,852	1938	22,66
0,67	4,766	23,15	1,058	21,330	1954	22,84
0,69	4,836	24,26	0,433	22,360	1981	23,16
0,69	4,869	23,37	0,452	22,038	1994	23,30
0,73	5,029	27,63	0,417	23,225	2056	23,99
0,78	5,279	34,24	-0,067	24,226	2146	25,06
0,83	5,467	42,03	-0,155	24,928	2220	25,82
0,84	5,498	42,95	-0,064	-	2227	25,95
0,89	5,672	42,92	0,083	25,081	2294	26,63
0,89	5,677	44,46	0,199	25,372	2296	26,65
0,90	5,720	43,57	0,165	25,368	2306	26,90
0,93	5,820	46,72	0,344	25,843	2340	27,50
0,94	5,862	44,69	0,307	25,876	2354	27,39
0,95	5,895	45,61	0,104	25,889	2364	27,66
0,97	5,957	48,73	0,349	-	2379	27,78
0,99	5,999	48,62	0,041	19,920	2395	27,96
1,01	6,032	48,29	-0,069	26,373	2402	28,11
1,01	6,025	48,81	-0,0760	26,490	2405	28,07
1,04	6,079	48,47	-0,062	26,858	2411	28,35
1,06	6,090	52,39	-0,308	26,713	2413	28,44
1,06	6,106	49,94	-0,037	-	2412	28,54
1,07	6,114	48,14	-0,154	-	2410	28,61
1,08	6,103	50,83	-0,140	26,646	2407	28,59
1,09	6,109	49,41	-0,043	27,168	2404	28,66
1,10	6,137	49,41	-0,227	27,102	2398	28,84
1,11	6,111	49,47	-0,178	27,194	2396	28,74
1,14	6,107	47,32	-0,089	27,196	2382	28,84
1,14	6,133	47,81	-0,189	26,974	2378	28,84

Dans le domaine de composition où il était possible de mesurer la vitesse de propagation de la flamme, on note une augmentation de la vitesse avec celle du rapport d'équivalence (Figure 116). Lorsque ce dernier atteint la valeur de 1,06, la vitesse spatiale (Figure 116a) et fondamentale (Figure 116c) sont maximales : respectivement 317 cm.s<sup>-1</sup> et

$52,38 \text{ cm.s}^{-1}$ . Puis au-delà de ce rapport d'équivalence, la vitesse, spatiale fondamentale, de flamme décroît. Ainsi, l'augmentation de la pression initiale de 1 à 4 bar a eu pour effet de diminuer fortement la vitesse fondamentale de flamme maximale qui passe ainsi de  $69,91 \text{ cm.s}^{-1}$  à  $52,38 \text{ cm.s}^{-1}$ , soit une réduction d'environ 30 %.

La Figure 116b et d illustre également l'évolution des longueurs de Markstein en fonction du rapport d'équivalence. On note encore une fois une diminution des longueurs de Markstein à mesure que le rapport d'équivalence augmente. Le changement de signe se produit au voisinage du rapport d'équivalence critique de 0,77 indiquant le début de l'apparition des instabilités thermo-diffusives responsables du plissement de la flamme. On peut noter que cette apparition se produit pour un rapport d'équivalence plus faible que celui obtenu à 1 bar.

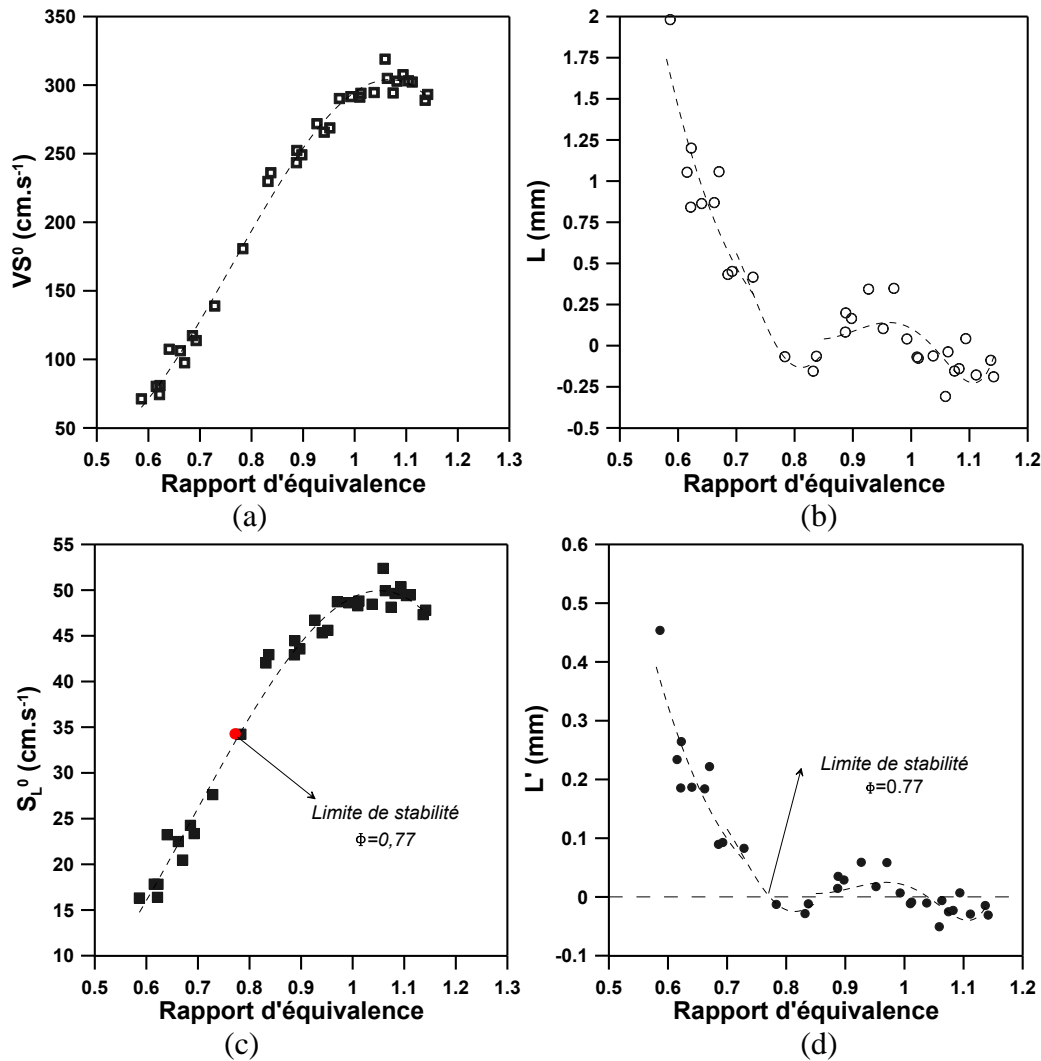


Figure 116. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle gazole / air à 423K et 4 bar de pression initiale.

La richesse minimale pour laquelle une inflammation suivie d'une propagation totale a été obtenue est de 0,59 (Figure 117). Par contre, les mesures n'ont pu être réalisées que jusqu'à une richesse de 1,14 en raison de l'apparition précoce des instabilités thermo-diffusives rendant la détermination des vitesses fondamentales de flamme impossible (Figure 119). Ainsi la flamme a présenté une surface de flamme plissée dès un rapport



d'équivalence de 0,73 (Figure 118) même si dans ce cas le plissement est très faible, ce qui n'empêche pas la détermination de la vitesse fondamentale de flamme.

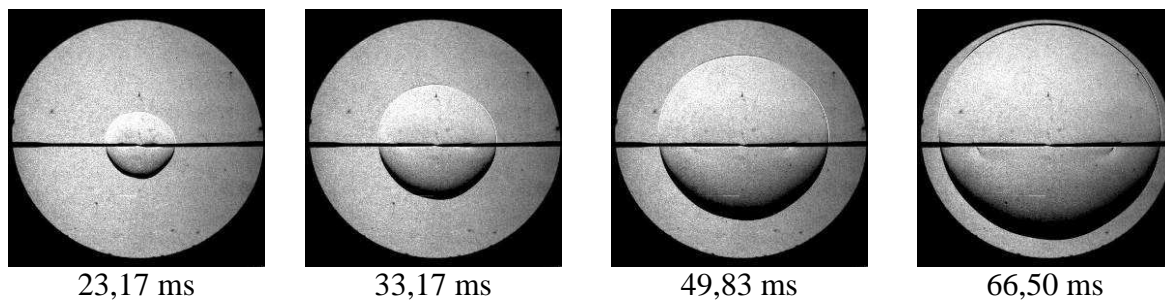


Figure 117. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,59.

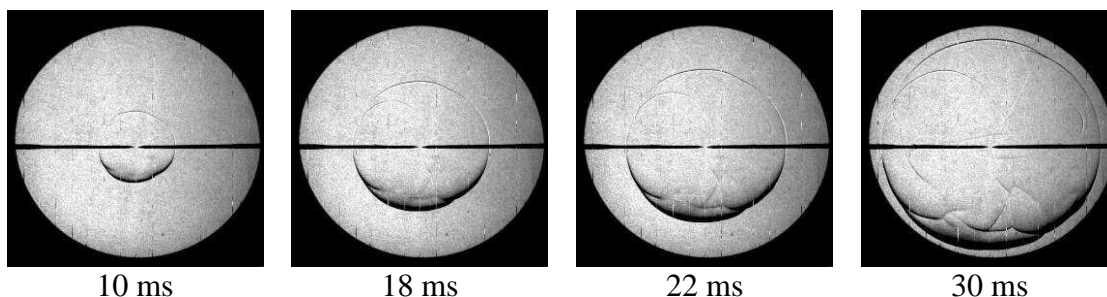


Figure 118. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,73.

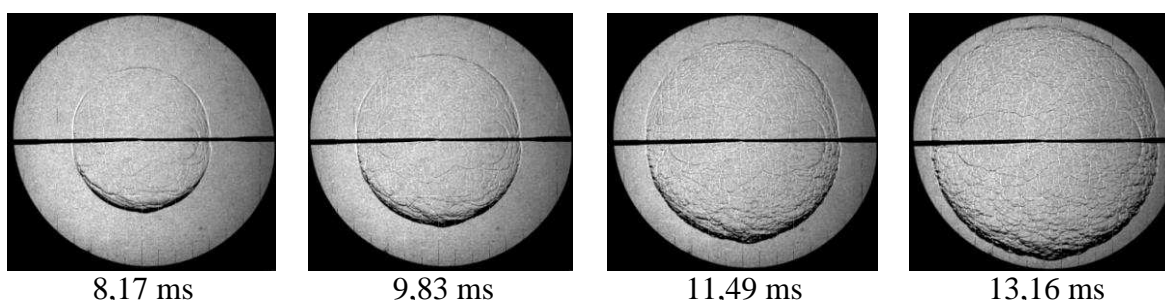


Figure 119. Images de la flamme au cours de sa propagation pour le mélange 0,7 /0,3 *n*-décane/1-méthylnaphtalène dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,14.

### 5.8.6 Carburant modèle type B30: 49%mol *n*-décane-30%mol octanoate de méthyle-21%mol 1-méthylnaphtalène

#### a) Résultats obtenus à une pression initiale de 1 bar

Afin de quantifier l'impact de l'ajout d'un composé oxygéné représentatif des esters méthyliques d'huile végétale sur les vitesses fondamentales de combustion du gazole, nous avons étudié le mélange combustible ternaire correspondant au mélange modèle du gazole auquel nous avons rajouté 30 % en volume d'octanoate de méthyle. Ainsi le combustible ternaire étudié est composé de : 49 % de *n*-décane, 21 % d'1-méthylnaphtalène et 30 % d'octanoate de méthyle. Comme précédemment, la combustion de ce mélange a été étudiée dans l'air. La température initiale a été fixée à 423 K. Pour ce mélange, les mesures ont été



réalisées pour deux pressions initiales différentes : 1 et 4 bar. Dans le Tableau 35 ci-dessous, les conditions expérimentales utilisées dans ce cas sont présentées.

**Tableau 35. Résultats expérimentaux pour le B30 modèle à 1 bar et 423K.  $L'$  : longueur de Markstein, TF : température de flamme adiabatique et PAICC (combustion adiabatique, isochore)**

$\phi$	$\Sigma$	$S_{Lo}$ (cm/s)	$L'$ (mm)	$P_{max}$ (bar)	$T_F$ à $P_{cste}$ (K)	$P_{AICC}$ (bar)
0,61	4,488	32,578	3,867	5,080	1839	5,379
0,63	4,586	37,106	3,924	5,191	1876	5,488
0,63	4,585	36,393	3,611	5,229	1876	5,493
0,70	4,902	43,962	2,620	5,611	1993	5,837
0,70	4,921	45,857	2,544	5,673	2000	5,857
0,79	5,307	51,999	1,449	6,016	2143	6,242
0,82	5,421	57,707	2,078	6,103	2184	6,359
0,84	5,482	54,991	1,985	6,050	2206	6,412
0,85	5,512	57,711	1,436	6,202	2221	6,438
0,91	5,708	62,218	1,474	6,302	2281	6,631
0,92	5,733	62,776	1,519	6,328	2293	6,652
0,94	5,771	62,801	1,198	6,387	2309	6,694
0,95	5,819	62,496	1,198	6,373	2315	6,741
0,97	5,888	66,159	1,268	6,467	2330	6,829
0,98	5,875	65,487	1,406	6,454	2335	6,805
1,03	5,975	65,744	1,139	6,588	2357	6,94
1,05	6,003	65,815	1,220	6,603	2360	6,956
1,07	6,030	66,621	1,119	6,564		7,018
1,07	6,045	65,796	1,152	6,659	2361	7,016
1,10	6,039	66,501	1,015	6,598	2358	7,018
1,11	6,055	66,267	1,090	6,639	2356	7,043
1,12	6,058	66,713	1,137	6,701	2352	7,056
1,15	6,065	64,746	0,804	6,694	2341	7,113
1,20	6,069	64,517	0,176	6,741	2312	7,178
1,20	6,054	62,078	0,482	6,678	2310	7,142
1,21	6,064	62,874	0,973	6,713	2303	7,171
1,24	6,062	60,536	0,871	6,658	2281	7,186
1,30	6,004	54,162	0,182	6,522	2242	7,174
1,36	5,974	51,195	-0,085	6,710	2195	7,163
1,38	5,946	45,034	-0,238	6,558	2180	7,169
1,48	5,885	37,318	-0,899	6,998	2107	7,113
1,48	5,882	36,716	-0,730	6,890	2105	7,111
1,51	5,860	32,747	-1,172	-	2084	7,086
1,51	5,854	31,732	-1,374	6,792	2079	7,081

Les mesures des vitesses de propagation de flamme ont été réalisées pour des rapports d'équivalence compris entre 0,61 et 1,51. Pour des richesses supérieures à 1,51, le plissement important de la flamme ne permettait plus de dériver les vitesses de propagation de flamme. Par contre, côté pauvre, il n'a pas été possible d'enflammer le mélange pour des fractions molaires en hydrocarbure inférieures à 0,009. Comme pour les autres mélanges,

on retrouve l'évolution classique de la vitesse de flamme (spatiale ou fondamentale) en forme de cloche. La vitesse spatiale de propagation de flamme atteint la valeur maximale de 404 cm/s pour un rapport d'équivalence de 1,12 (Figure 120-(a)). La vitesse fondamentale de flamme atteint la valeur maximale de 67 cm/s pour le même rapport d'équivalence (Figure 120-(c)). Nous avons aussi tracé l'évolution des longueurs de Markstein (Figure 120b et d) en fonction du rapport d'équivalence. Encore une fois, on retrouve un comportement comparable à ceux des autres mélanges. Les longueurs sont maximales pour le mélange le plus pauvre, puis elles décroissent avec l'enrichissement du mélange en combustible. Pour une richesse critique de 1,35, on note le changement de signe de cette longueur indiquant l'apparition de la prépondérance des instabilités thermo-diffusives et qui se traduit par un plissement de la flamme de plus en plus prononcé.

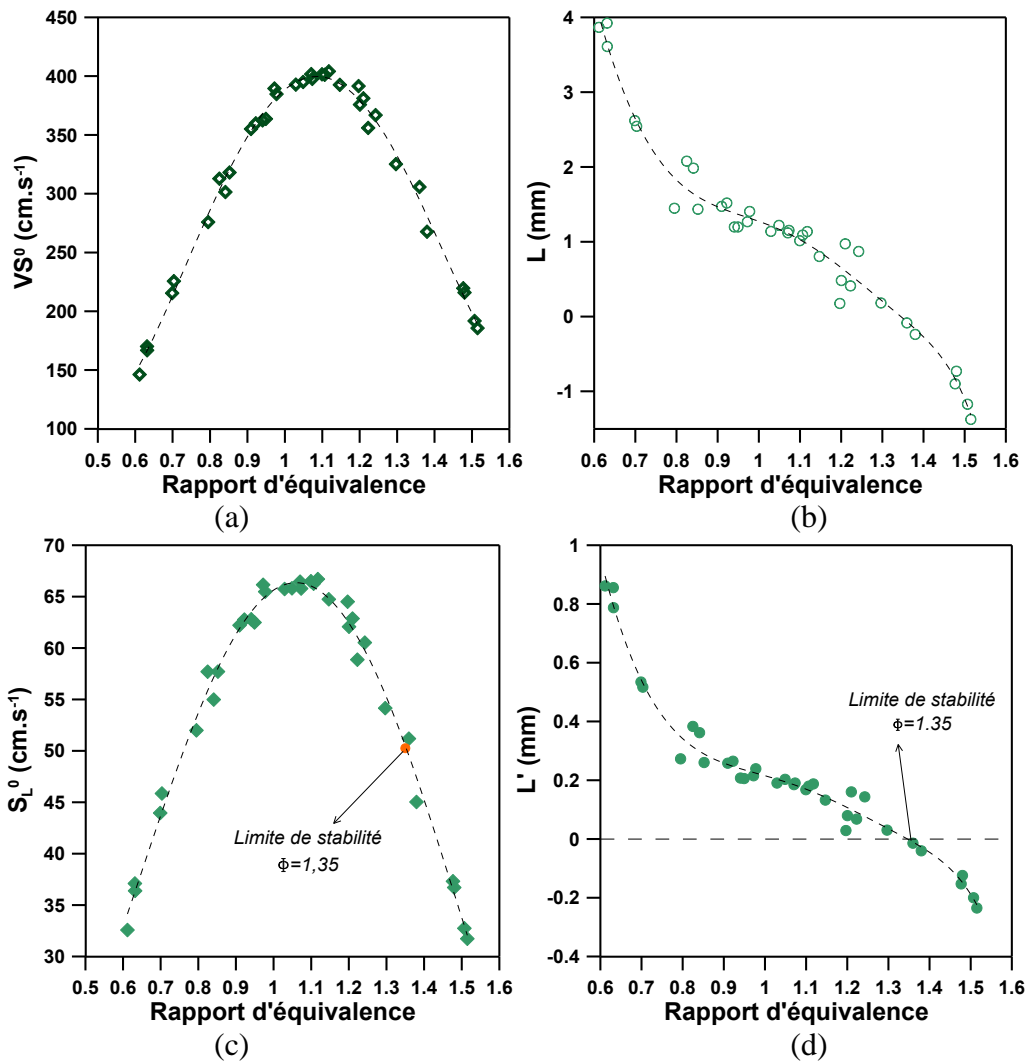


Figure 120. Vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et de la longueur de Markstein (b et d) en fonction de la richesse de B30 modèle/air à 423K et 1 bar.

Le domaine de richesse pour lequel une flamme a été obtenue suivie d'une propagation totale est compris entre 0,61 et 1,51. Ainsi, depuis la limite inférieure d'inflammation, soit à  $\phi=0,61$  jusqu'au voisinage de 1,15, une flamme sphérique présentant un front lisse est obtenue comme on peut le voir sur la Figure 121.

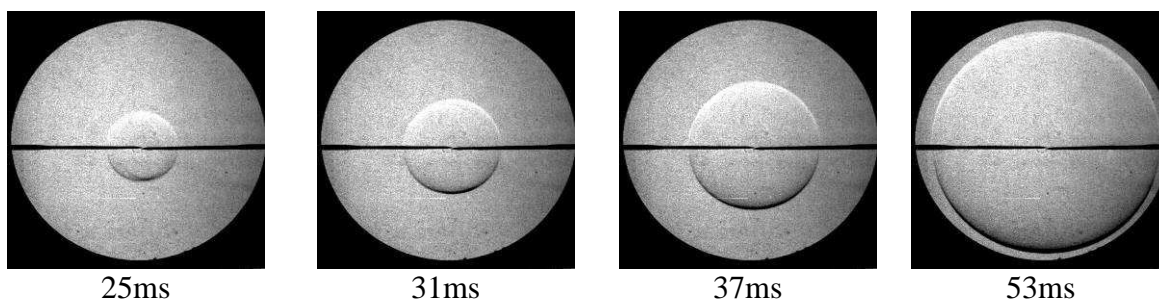


Figure 121. Images de la flamme au cours de sa propagation du B30 modèle dans l'air 1 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,61.

Lorsque le rapport d'équivalence est de 1,22, nous notons l'apparition de cellules de grande dimension qui n'altèrent que très légèrement la surface de la flamme, comme on peut le voir sur la Figure 122.

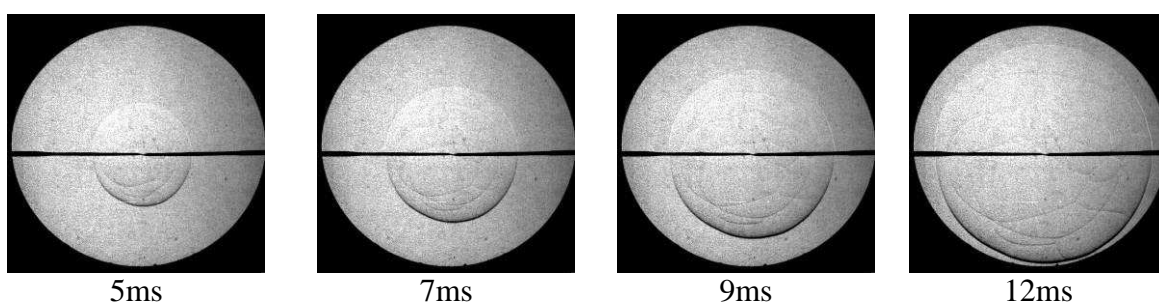


Figure 122. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 1 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,22.

Par contre, au-delà, le plissement de la flamme devient d'autant plus important que le rapport d'équivalence est grand. Un exemple du plissement de la flamme est donné sur la Figure 123 pour un rapport d'équivalence de 1,51.

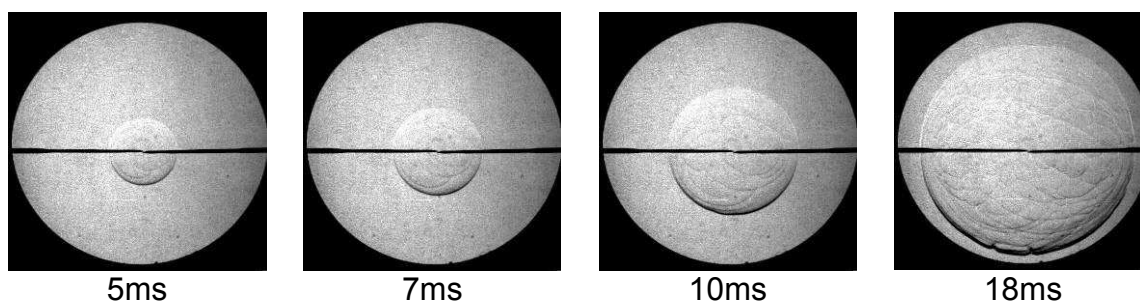


Figure 123. Images de la flamme au cours de sa propagation dans le cas du B30 modèle dans l'air à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,51.

b) *Résultats obtenues à une pression initiale de 4 bar*

Comme pour le carburant précédent, on a également mesuré la vitesse fondamentale de flamme pour une température initiale de 423K à 4 bar de pression initiale. Les détails des conditions expérimentales se trouvent sur le Tableau 36.

**Tableau 36. Résultats expérimentaux du carburant modèle type B30 à 4 bar et 423K.  $L'$  : nombre de Markstein,  $T_F$  : température de flamme adiabatique et PAICC : combustion adiabatique, isochore.**

$\varphi$	$\Sigma$	$S_{Lo}$ (cm/s)	$L'$ (mm)	$P_{max}$ (bar)	$T_F$ à $P_{cste}$ (K)	$P_{AICC}$ (bar)
0,62	4,53	19,758	1,442	20,945	1854	21,750
0,72	4,99	26,788	0,840	23,111	2027	23,890
0,74	5,10	31,468	0,681	23,572	2070	24,383
0,77	5,22	34,064	0,522	23,918	2114	24,820
0,78	5,26	35,009	0,562	24,280	2134	24,986
0,84	5,52	39,562	0,389	25,137	2225	26,058
0,89	5,70	42,731	0,279	25,377	2288	26,903
0,97	5,94	47,512	0,186	26,112	2370	27,704
1,02	6,06	49,894	0,240	26,271	2395	28,215
1,04	6,10	50,825	0,388	-	2401	28,435
1,08	6,13	50,278	0,082	26,861	2397	28,690
1,08	6,11	51,369	0,227	26,936	2397	28,635
1,12	6,13	49,801	-0,037	26,951	2378	28,904
1,20	6,10	47,379	-0,224	21,639	2324	29,051

Dans le domaine de composition où la flamme présente une surface lisse voire légèrement plissée, nous avons pu mesurer les vitesses de propagation de flamme, spatiale et fondamentale. Leur évolution en fonction du rapport d'équivalence est reportée sur la Figure 124, (a) pour la vitesse spatiale à étirement nul et (c) pour la vitesse fondamentale à étirement nul. A la limite inférieure, ( $\varphi=0,62$ ), les vitesses spatiale et fondamentale de flamme sont respectivement de 89, 4 et 19,8 cm/s. Puis, ces dernières augmentent avec le rapport d'équivalence pour atteindre un maximum, de 314 cm/s pour la vitesse spatiale et 51 cm/s pour la vitesse fondamentale. Ce maximum est obtenu pour un rapport d'équivalence de 1,08.

Les longueurs de Markstein ont aussi été tracées en fonction du rapport d'équivalence, on trouve l'évolution classique, à savoir une décroissance de la longueur de Markstein avec l'enrichissement du mélange en combustible. La limite de stabilité étant observée pour rapport d'équivalence voisin de 0,84 (Figure 124 (c) et (d)).

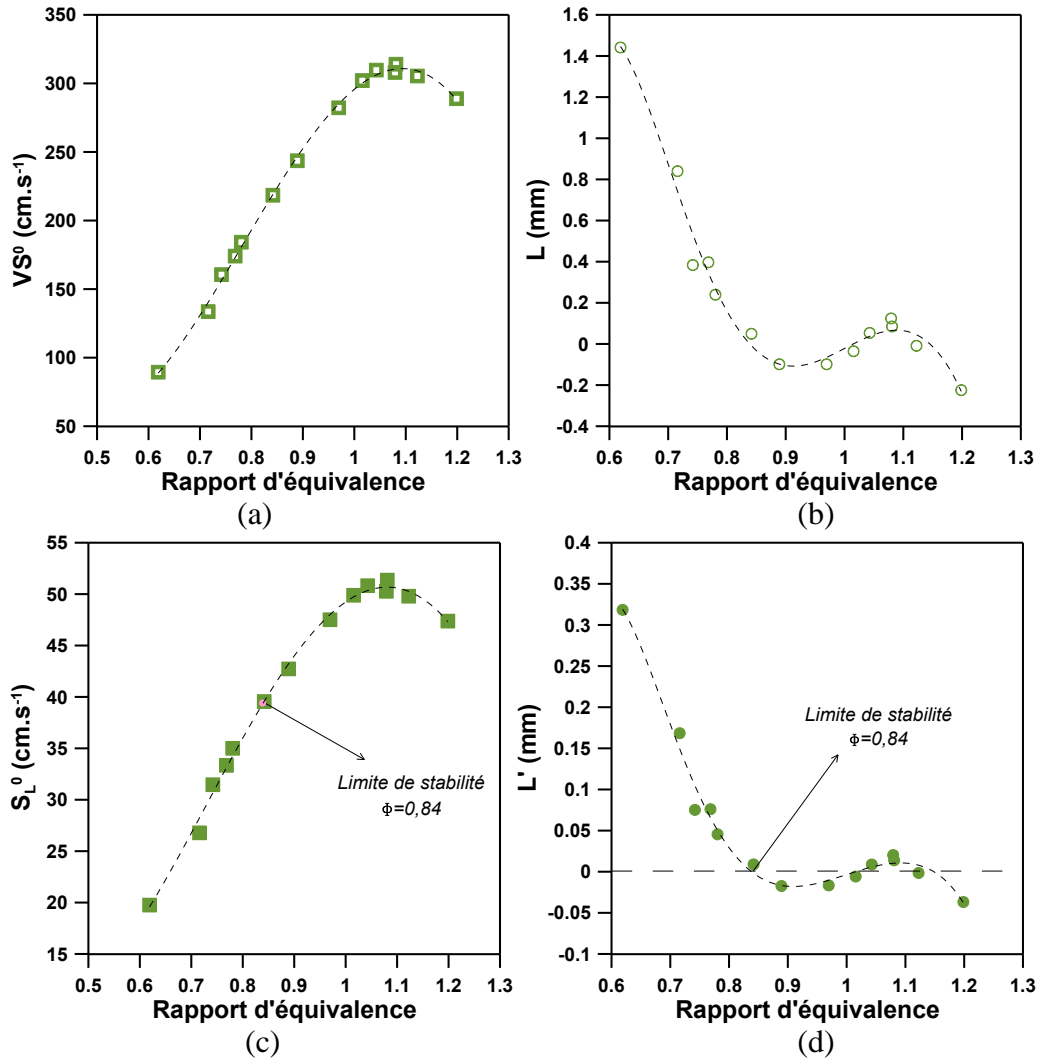


Figure 124. Evolution de la vitesse spatiale (a) et fondamentale (c) de flamme laminaire à étirement nul et la longueur de Markstein (b) et (d) en fonction du rapport d'équivalence pour des B30 modèle / air à 423K et 4 bar.

La combustion de ce mélange a aussi été étudiée à une pression initiale de 4 bar et une température initiale de 423 K. La teneur minimale en combustible pour laquelle une flamme a été obtenue est de 0,91 %<sub>mol</sub> dans l'air soit  $\phi=0,62$ . La flamme à cette composition présente une surface lisse comme on peut le voir sur la Figure 125.

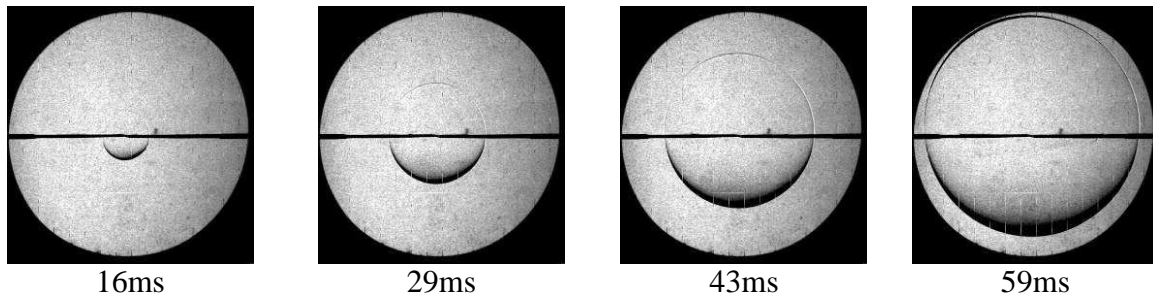


Figure 125. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,62.



Par contre, lorsque la teneur en combustible est augmentée, le plissement de la flamme apparaît pour des  $\phi \leq 1$  comme on peut le voir sur la Figure 126 qui représente des images de la flamme prises à différents instants, pour un rapport d'équivalence de 0,97 et où les cellules sont bien visibles.

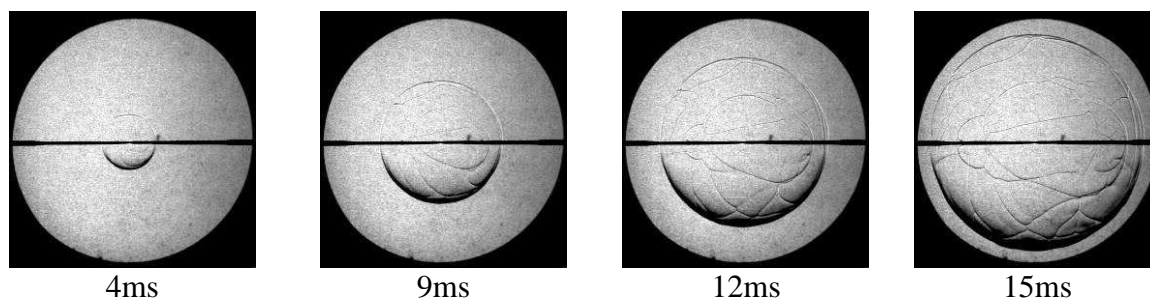


Figure 126. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 0,97.

Le plissement de la flamme s'accroît encore avec le rapport d'équivalence jusqu'à être responsable d'un tel accroissement de la surface qu'il devient impossible d'extraire la vitesse fondamentale de flamme à partir de l'enregistrement de sa propagation comme on peut le voir sur la Figure 127 pour le rapport d'équivalence de 1,2.

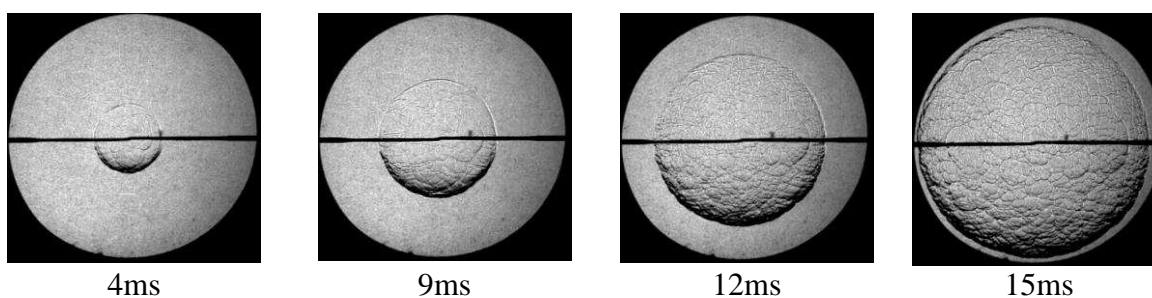


Figure 127. Images de la flamme au cours de sa propagation du carburant modèle B30 dans l'air initialement à 4 bar et 423 K. Le rapport d'équivalence est de 1,2.

## 5.9 Analyses de résultats

### 5.9.1 Effet de la pression initiale sur la vitesse de flamme des carburants modèles

#### a) *Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle gazole*

Comme on peut le voir sur la Figure 128, l'augmentation de la pression initiale de 1 à 4 bar a pour résultat une réduction de la vitesse de flamme, spatiale ou fondamentale, ainsi que de la longueur de Markstein sur tout le domaine étudié. On peut noter aussi que l'augmentation de la pression initiale n'a pas induit de modification du rapport d'équivalence pour lequel une flamme est obtenue, mais a eu pour effet de favoriser l'apparition du plissement de la flamme réduisant ainsi le domaine d'études.

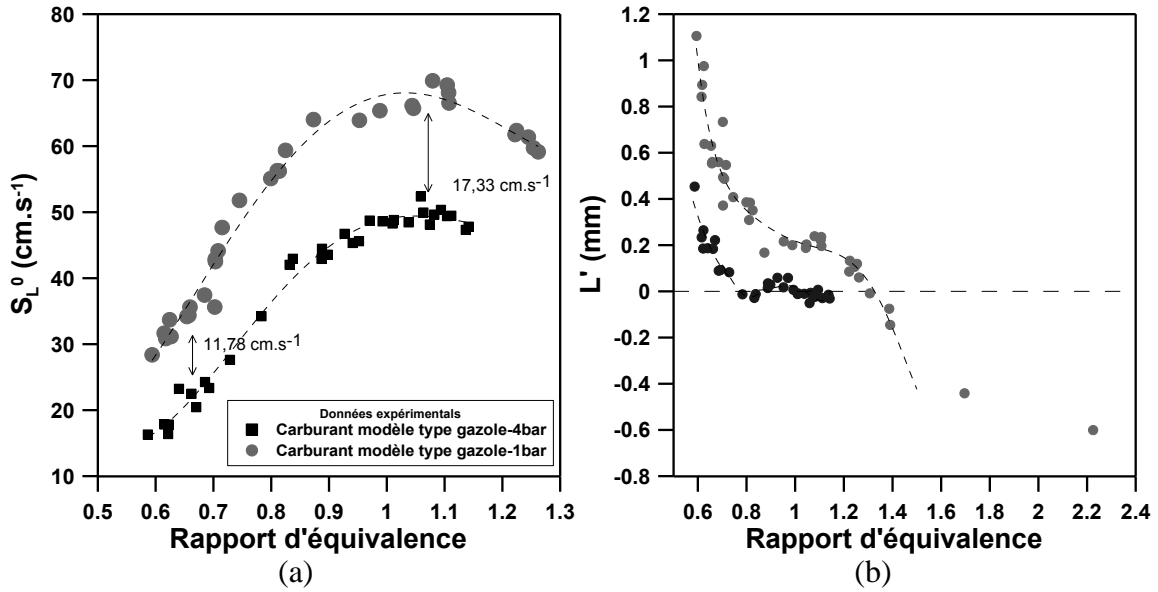


Figure 128. Comparatif entre les évolutions de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul (a) et longueurs de Markstein (b) en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges carburant modèle type gazole / air à 423K et 1 et 4 bar de pression initiale.

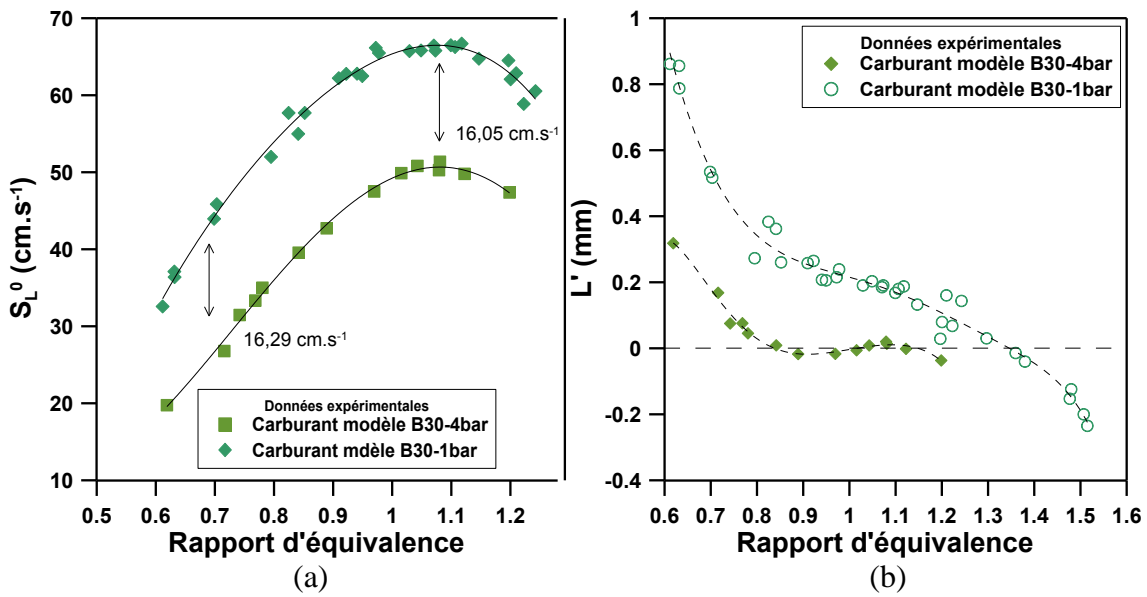


Figure 129. Comparatif entre les évolutions de la vitesse de flamme laminaire à étirement nul en fonction du rapport d'équivalence pour des mélanges de carburant modèle B30 / air à 423K et 1 et 4 bar de pression initiale.

a) *Effet de la pression sur la vitesse de flamme du carburant modèle B30*

La Figure 129-(a) illustre l'impact de l'augmentation de la pression initiale sur la vitesse fondamentale de flamme. On note ainsi que l'augmentation de la pression initiale a pour effet d'abaisser la vitesse fondamentale de flamme sur tout le domaine d'inflammation mais cet effet est plus marqué pour des rapports d'équivalence autour de 1. Ainsi, la vitesse maximale de flamme observée chute de 67 cm/s à 51 cm/s lorsque la pression initiale passe de 1 à 4 bar. Le rapport d'équivalence pour lequel ce maximum est observé est aussi plus

bas (1,08) à 4 bar qu'il ne l'est à 1 bar (1,12). L'augmentation de la pression initiale a aussi un effet sur les longueurs de Markstein qui sont plus faibles à 4 bar qu'elles ne l'étaient à 1 bar (La Figure 129-(b)). De même l'apparition des instabilités thermo-diffusives se fait pour un rapport d'équivalence plus petit à 4 bar (0,9) qu'à 1 bar (1,35).

## 5.10 Modélisation

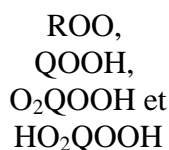
Le modèle cinétique détaillé initial développé et validé en JSR (Chapitre 3) est constitué de 7748 réactions réversibles et de 1964 espèces. Ce modèle a été amélioré lors d'une nouvelle validation en tube à choc (chapitre 4) où plus de réactions de croisement et de nouvelles réactions pour l'oxydation d'espèces aromatiques ont été ajoutées. Cette dernière version du modèle est constituée de 7865 réactions réversibles et de 1975 espèces.

L'utilisation d'un grand mécanisme détaillé exige un énorme temps CPU. Ainsi, le principal problème de ces calculs se manifeste par la complexité à résoudre un problème de flamme, combinant les paramètres cinétiques, thermodynamiques et de transport de chaque espèce concernée. Pour cette raison, une réduction du mécanisme de départ a été nécessaire avant d'effectuer les simulations.

### 5.10.1 Réduction et validation du modèle cinétique d'oxydation

#### a) Régime à basse température

Le mécanisme de départ développé dans le chapitre précédent a été confronté avec les données expérimentales en tube à choc et JSR. Il s'agit d'un mécanisme robuste validé pour toute la gamme de température qui montre un très bon accord avec les expériences. Cependant, ce mécanisme comprend de nombreuses espèces et réactions pertinentes à l'oxydation à basse température qui sont inutiles pour les simulations de vitesses de flammes qui ne dépendent que des réactions décrivant la cinétique à haute température. Ainsi, la première étape de sa réduction a consisté à enlever les espèces du mécanisme de basse température :



Le mécanisme résultant est composé par 408 espèces et 2712 réactions.

#### b) Régime à haute température-Méthode PFA (*path flux analysis*)

La deuxième étape de la réduction du mécanisme détaillé a été réalisée en utilisant la méthode de *path flux analysis* (PFA). Une description plus détaillée de la méthode PFA pour la réduction de mécanismes a été publiée par Sun *et al.* 2010, Lu *et al.* 2001 et Gou *et al.* 2010.



La méthode PFA est basée sur la vitesse de réaction absolue en identifiant les voies réactionnelles significatives pour la production et la consommation des premières générations. Ainsi, les coefficients de consommation et de production des espèces A via des espèces B des deux premières générations sont définis comme Sun *et al.* 2010 :

$$r_{AB}^{pro-1st} = \frac{P_{AB}}{\max(P_A, C_A)} \quad \text{et} \quad r_{AB}^{pro-2nd} = \sum_{M_i \neq A, B} (r_{AM_i}^{pro-1st} r_{M_i B}^{pro-1st})$$

$$r_{AB}^{con-1st} = \frac{C_{AB}}{\max(P_A, C_A)} \quad \text{et} \quad r_{AB}^{con-2nd} = \sum_{M_i \neq A, B} (r_{AM_i}^{con-1st} r_{M_i B}^{con-1st})$$

où  $P_A$  et  $C_A$  correspondent aux taux de production et de consommation des espèces.

La sommation ici comprend tous les chemins (taux) réactionnels possibles se rapportant à A et B. En théorie, différentes valeurs de seuil peuvent être définies pour différents coefficients d'interaction. Pour plus de simplicité, on peut regrouper tous les coefficients d'interaction ensemble pour ne former qu'une seule valeur de seuil :

$$r_{AB} = r_{AB}^{pro-1er} + r_{AB}^{con-1er} + r_{AB}^{pro-2eme} + r_{AB}^{con-2eme}$$

Le coefficient défini ci-dessus est utilisé pour évaluer la dépendance de l'espèce B à l'espèce A. Pour démontrer la stratégie du modèle actuel, un schéma du taux de transfert entre A et B via les autres réactifs ( $M_i$ ) est représenté dans la Figure 130.

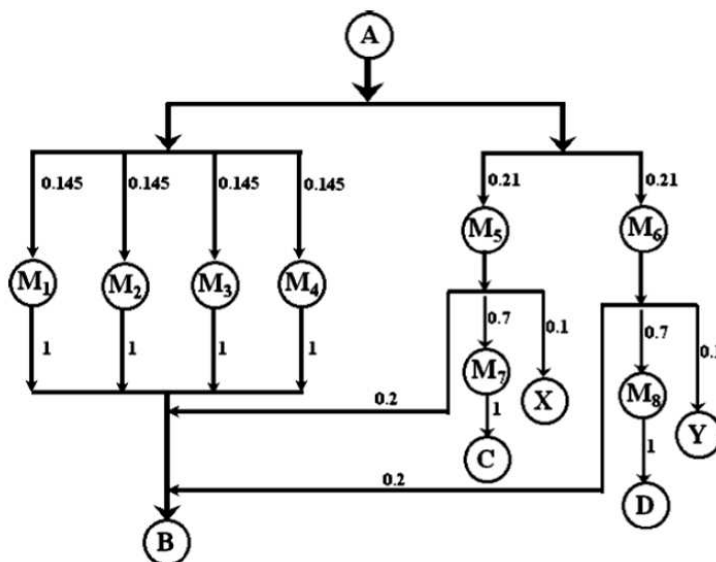


Figure 130. Schéma du taux de transfert entre A et B via les autres réactifs  $M_i$  (Sun *et al.* 2010).

Le mécanisme résultant est constitué de 1893 réactions réversibles et 245 espèces. Il a été réduit en tenant compte des prédictions des délais d'auto-inflammation du 1-méthyl-naphtalène pur, du  $n$ -décane pur, de l'octanoate de méthyle pur, ainsi que des carburants modèle type gazole et B30. Ce nouveau mécanisme généré ne peut être utilisé

que pour des régimes d'oxydation à haute température ( $T \geq 1000\text{K}$ ), à différentes richesses et pressions.

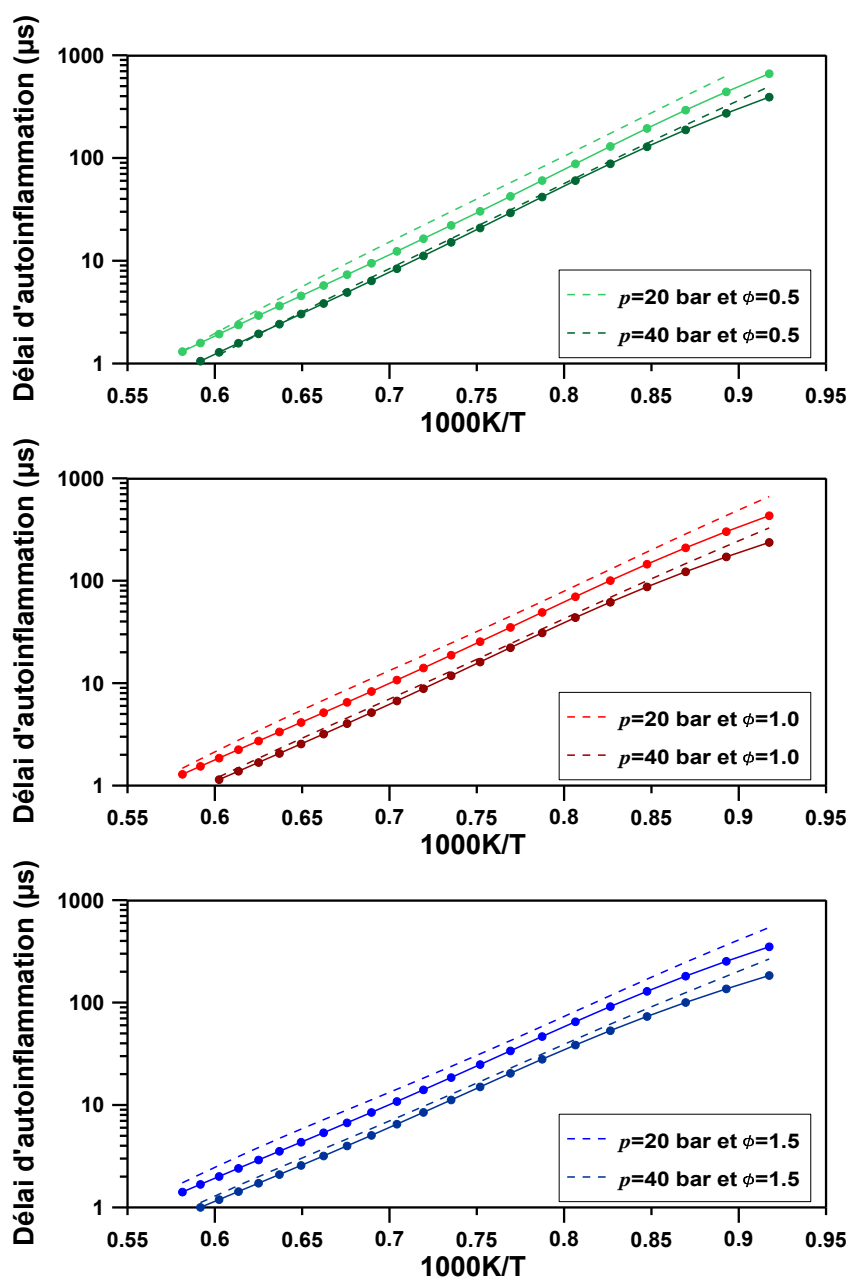


Figure 131. Délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 à haute température. Lignes continues avec des symboles : prédictions du mécanisme détaillé. Lignes en pointillé : prédictions du mécanisme réduit.

Afin de valider le mécanisme réduit, des délais d'auto-inflammation ont été calculés à l'aide de SENKIN Lutz *et al.* 1987. La Figure 131 représente les prédictions des délais d'auto-inflammation du mécanisme détaillé et réduit. On peut observer un accord raisonnable entre les prédictions des deux mécanismes. Toutefois, de légers écarts sont observés en raison de la chimie à basse température supprimée lors de la première étape de la réduction du mécanisme, ce qui confirme son influence significative sur l'oxydation à des régimes de températures plus élevées.

Le mécanisme réduit proposé dans la présente étude est capable de prédire les vitesses de flamme laminaire des carburants modèles gazole et B30. Les calculs de propagation de flammes ont été effectués en utilisant DARS (Digital Analysis of Reaction Systems). DARS est un logiciel commercial pour les calculs des systèmes de cinétique pour des applications en ingénierie.

### 5.10.2 Confrontation modèle-expérience en bombe sphérique SF2

Malgré la réduction du mécanisme, les calculs de vitesse de flamme sont lourds et il n'est pas toujours facile d'obtenir une solution. Ainsi, seulement quelques prédictions ont été obtenues à l'aide de DARS. Les vitesses fondamentales de flamme ont été calculées à 1bar pour le gazole modèle et le B30 modèle.

#### a) Modélisation des vitesses de flamme *n*-décane-air

Les vitesses de flamme du *n*-décane mesurées par Kumar *et al.* 2007 et Ji *et al.* 2010 ont été simulées afin de vérifier la validité du mécanisme cinétique proposé ici. Comme on peut le voir sur la Figure 132, le modèle proposé représente raisonnablement les résultats de la littérature.

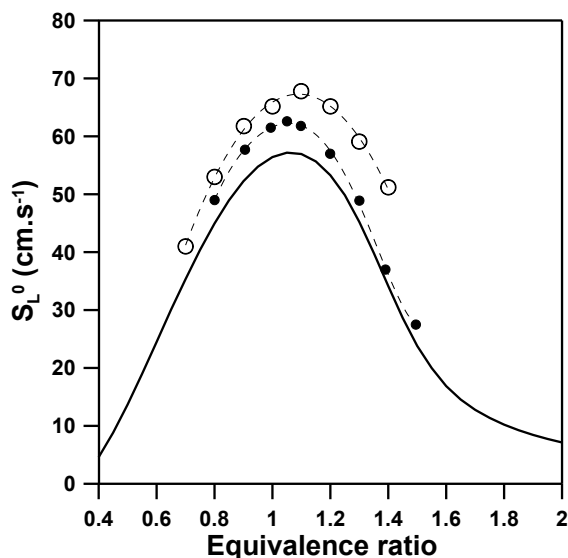


Figure 132. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les vitesses de flamme mesurées par Kumar *et al.* 2007 (symboles vides) et Ji *et al.* 2010 (symboles pleins) du *n*-décane à 1bar et 423 K.

#### b) Carburant modèle type gazole (IDEA-fuel) dans l'air

Pour le cas du gazole modèle contenant 70% de *n*-décane +30% du 1-méthyl-naphtalène, on a effectué les simulations à 1bar et 423K pour toute la gamme de rapport d'équivalence. Comme le montre la Figure 133 le mécanisme réduction prédit bien les vitesses de flammes avec une erreur maximale de 6,65%.

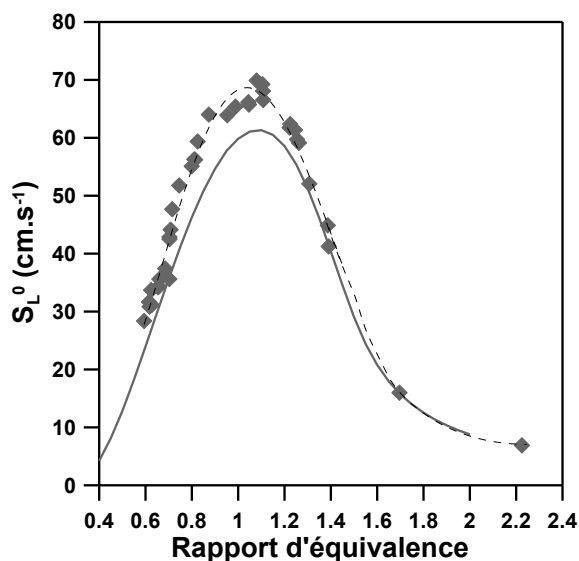


Figure 133. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les expériences (symboles et pointillés) des vitesses de flammes du gazole modèle à 1bar et 423 K.

c) Carburant modèle type B30 dans l'air

De la même façon, pour le cas du B30 modèle composé de 30% d'octanoate de méthyle + 70% de IDEA-fuel en mole, on a choisi de ne simuler que les flammes laminaire à 1bar et 423K pour toute la gamme de rapport d'équivalence. La Figure 134 montre les résultats expérimentaux de vitesses de flamme et ses prédictions dans les mêmes conditions en fonction des rapports d'équivalences.

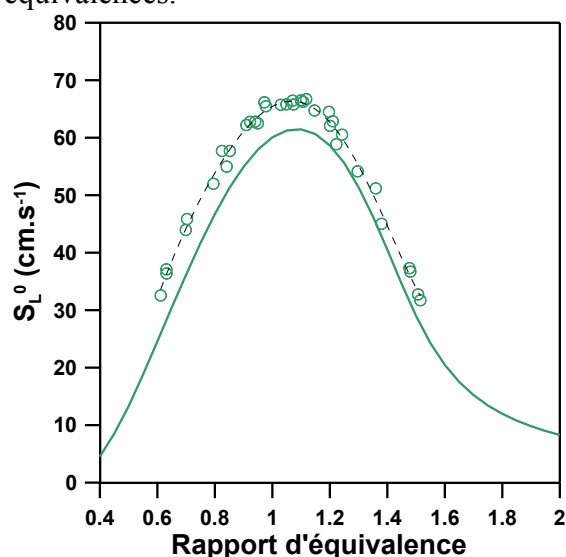


Figure 134. Confrontation du modèle (ligne continue) avec les expériences (symboles) des vitesses de flammes du carburant modèle B30 à 1bar et 423 K.

Le modèle cinétique prédit les données expérimentales avec une erreur maximale de 6,4%.

## **Conclusion**

Dans cette dernière partie de l'étude, on a mesuré les vitesses fondamentales de combustion pour les carburants modèles de type gazole (70% mol de *n*-décane/ 30% mol d'1-méthyl-naphthalène) et de type B30 (49% mol de *n*-décane/ 21% mol d'1-méthyl-naphthalène/ 30% mol d'octanoate de méthyle). Ces vitesses fondamentales de flamme ont été mesurées par la technique de la bombe sphérique à deux pressions initiales, i.e., 1 et 4 bar, et à une température initiale fixée à 423K. A partir de ces résultats, on a également déduit la longueur de Markstein et son évolution en fonction de la composition du mélange combustible.

Le mécanisme détaillé (7869 réactions et 1974 espèces) validé précédemment en tube à choc et en JSR a été réduit en utilisant la méthode PFA et en supprimant la chimie d'oxydation de basse température. Les prédictions obtenues en utilisant ce modèle réduit sont en bon accord avec les vitesses fondamentales mesurées.

## *Conclusions et perspectives*

Les biocarburants jouent un rôle important en contribuant à la carburation de l'automobile d'aujourd'hui et de demain. Une bonne maîtrise de leur combustion permettra de proposer une incorporation dans les carburants en plus forte proportion, sans risque et sans modification du moteur .

Les carburants à la pompe sont des mélanges complexes constitués de milliers de molécules. Compte tenu de cette complexité, des carburants modèles peuvent être constitués par une ou deux molécules de chaque famille chimique constituante du carburant (n-paraffines, iso-paraffines, naphènes et aromatiques), choisies en fonction des propriétés physico-chimiques du carburant à représenter. Dans cette étude, les composés choisis comme carburant modèle pour les mélange gazole/bio-Diesel ont été : le *n*-décane (représentant les n-paraffines), le 1-méthyl-naphtalène (représentant les hydrocarbures aromatiques) et l'octanoate de méthyle (représentant les esters méthyliques d'huile végétale).

Les principaux objectifs de cette étude étaient de :

- Proposer des carburants modèles qui pourraient bien représenter les carburants réels de type gazole et B30.
- Modéliser la cinétique d'oxydation et/ou de combustion des ces carburants réels ainsi que de ces carburants modèles, (i) un gazole composé par 30% en mole de 1-méthyl-naphtalène et 70% en mole de *n*-décane et (ii) un B30 composé par 21% en mole de 1-méthyl-naphtalène, 30% en mole d'octanoate de méthyle et 49% en mole de *n*-décane.
- Fournir plus de résultats expérimentaux pour la validation d'un modèle cinétique d'oxydation de gazole et bi-Diesel grâce aux profils de concentration des espèces intermédiaires et stables mesurés en JSR, de délais d'auto-inflammation mesurés en tube à choc et, enfin, de vitesse de flamme déterminées en bombe sphérique.

Le modèle cinétique proposé dans cette étude a été développé dans un premier temps pour un gazole réel et un carburant modèle de type gazole (70% *n*-decane/30% 1-méthyl-naphtalène en mole) dans des conditions diluées (10300 ppm de C) en utilisant un réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) en silice fondu dans une large gamme de conditions opératoires (560-1030 K, 6 et 10 bar, et un intervalle de richesse de 0.25 à 1.5) à un temps de passage fixé. Les résultats de ces expériences, consistant en des profils de concentration des réactifs, des intermédiaires stables et des produits de combustion, ont montré que le gazole réel et son carburant modèle s'oxydent de façon très similaire. Pour une première validation, ce premier schéma cinétique à

montré une concordance raisonnable entre les données expérimentales et les simulations.

Par la suite, l'application du mécanisme cinétique a été étendu à la modélisation de mélanges gazole/bio-Diesel. Pour cette raison, un carburant B30 réel et un carburant modèle composé de 49% de *n*-décane, 30% d'octanoate de méthyle et 21% de 1-méthyl-naphtalène en mol, ont été oxydés dans un JSR dans les mêmes conditions que pour le gazole (560-1030 K, 6 et 10 bar,  $0.25 \leq \phi \leq 1.5$ ). Le mécanisme cinétique détaillé était constitué de 7748 réactions impliquant 1964 espèces. Les résultats de la modélisation ont également montré un accord raisonnable entre les résultats des expériences et des modélisations. L'analyse des voies réactionnelles a montré l'importance de la production et la consommation des radicaux OH. La simulation en JSR a montré l'importance des interactions entre les composants primaires des carburants modèles pour l'oxydation à basse température du 1-méthyl-naphtalène via des réactions avec des radicaux issus de l'oxydation des constituants du carburant les plus réactifs (*n*-décane et octanoate de méthyle).

Une deuxième validation du modèle a été effectuée en tube à choc, où les délais d'auto-inflammation pour le carburant modèle B30 ont été mesurés derrière une onde de choc réfléchi à 20 et 40 bar,  $0,5 \leq \phi \leq 1,5$  et  $700 \leq T_5 \leq 1200$  K. L'utilisation de ce nouveau modèle a permis d'améliorer les modélisations en JSR et de bien décrire l'évolution des délais d'auto-inflammation en tube à choc dans une large gamme de conditions (de 700 à 1200 K, à 20 et 40 bars et  $0,5 \leq \phi \leq 1,5$ ). De plus, il a été constaté que le mécanisme proposé prévoit très bien les données expérimentales obtenues antérieurement pour des mélanges de *n*-décane et de 1-méthyl-naphtalène et pour le 1-méthyl-naphtalène (Wang *et al.* 2010). Les analyses des voies réactionnelles ont montré l'effet des nouvelles réactions sur la production et la consommation des radicaux OH. La modélisation a aussi montré que les interactions entre les composants du carburant étaient importantes à basse température (par exemple  $T = 640$  K). De plus, un effet plus prononcé à haute température a été observé par rapport aux travaux antérieurs en JSR.

Enfin, une troisième et dernière validation du mécanisme a été effectuée en bombe sphérique où des vitesses fondamentales de flamme ont été mesurées. Les vitesses de flamme du gazole modèle et du carburant modèle B30 ont été mesurées à des pressions initiales de 1 et 4 bar, une température initiale de 423 K et une large gamme de richesse. Les longueurs de Markstein ont également été déterminées pour tous les carburants étudiés. Le mécanisme détaillé, composé de 7869 réactions et 1974 espèces, obtenu lors de la validation en tube à choc, a été réduit en deux temps : (i) d'abord en supprimant la cinétique à basse température et (ii) en utilisant une méthode PFA de Sun *et al.* 2010 pour réduire la cinétique à haute température. Ensuite, ce modèle réduit (1893 réactions réversibles et 245 espèces), seulement valable à haute température a été utilisé pour les simulations. Ce modèle réduit peut décrire avec une bonne concordance les vitesses fondamentales de flamme des deux carburants modèles gazole et B30, ainsi que les vitesses de flamme du *n*-décane mesurées par Kumar *et al.* 2007 et Ji *et al.* 2010.

Les schémas cinétiques détaillés et réduits ont été validés pour une large gamme de données expérimentales : pour l'oxydation de gazole et B30 (carburants modèles et réels) en JSR, des carburants modèles en tube à choc et en bombe

sphérique. Par conséquent, les deux versions du mécanisme proposé (détaillé et réduit) sont appropriés aux prédictions de la cinétique d'oxydation des mélanges de carburants gazole/ bio-Diesel.

Les principales perspectives à ce travail sont :

- L'amélioration des prévisions du modèle pour l'auto-inflammation du gazole et du bio-Diesel
- L'amélioration des prédictions du modèle réduit pour les vitesses de flamme du gazole et du bio-Diesel et l'extension aux pressions élevées.
- L'application du modèle proposé à la modélisation de la combustion dans des moteurs.



## ***Références bibliographiques***

Allara, D. L. and R. Shau (1980). "A Compilation of Kinetic Parameters for the Thermal Degradation of n-Alkane Molecules." *J. Phys. Chem.*, **9** (524-559).

Alséda, D. (2007). Contrôle de la combustion en mode HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) par une formulation adaptée du carburant. Laboratoire ICARE. Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**.

Andrae, J., D. Johansson, P. Bjornbom, P. Risberg and G. Kalghatgi (2005). "Co-oxidation in the auto-ignition of primary reference fuels and n-heptane/toluene blends." *Combustion and Flame*, **140** (4): 267-286.

Asaba, T. and N. Fujii (1971). "Shock-tube study of high-temperature pyrolysis of benzene." *Symposium (International) on Combustion*, **13** (1): 155-164.

Bales-Gueret, C., M. Cathonnet, J. C. Boettner and F. Gaillard (1997). "Experimental Study and Kinetic Modeling of Higher Hydrocarbons Oxidation in a Jet-stirred Flow Reactor." *Energy & Fuels*, **6**: 189.

Barths, H., C. Hasse, G. Bikas and N. Peters (2000). "Simulation of combustion in direct injection diesel engines using a eulerian particle flamelet model." *Symposium (International) on Combustion*, **28** (1): 1161-1168.

Barths, H., H. Pitsch and N. Peters (1999). "3D simulation of DI Diesel combustion and pollutant formation using a two-component reference fuel." *Oil & Gas Science and Technology - Revue de L Institut Francais du Petrole*, **54** (2): 233-244.

Basha, S. A., K. R. Gopal and S. Jebaraj (2009). "A review on biodiesel production, combustion, emissions and performance." *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **13** (6-7): 1628-1634.

Battin-Leclerc, F. (2008). "Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates." *Progress in Energy and Combustion Science*, **34** (4): 440-498.

Baulch, D. L., C. J. Cobos, R. A. Cox, P. Frank, G. Hayman, T. Just, J. A. Kerr, T. Murrells, M. J. Pilling, J. Troe, R. W. Walker and J. Warnatz (1994). "Evaluated Kinetic Data for Combustion Modeling Supplement-I." *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **23** (6): 847-1033.

Bénézit, M. (2007). "Les biocarburant chez TOTAL." *IFP:Panorama07*.

Biet, J., M. H. Hakka, V. Warth, P. A. Glaude and F. Battin-Leclerc (2008). "Experimental and modeling study of the low-temperature oxidation of large alkanes." *Energy & Fuels*, **22** (4): 2258-2269.

Bikas, G. and N. Peters (2001). "Kinetic modelling of n-decane combustion and autoignition : Modeling combustion of n-decanem." *Combustion and Flame*, **126** (1-2): 1456-1475.

Bloch-Michel, V. (1995). Logiciel d'estimation de paramètres cinétiques de processus élémentaires en phase gazeuse. Nancy, Institut National Polytechnique de Lorraine.

Cancino, L. R., M. Fikri, A. A. M. Oliveira and C. Schulz (2009). Development and application of detailed chemical kinetics mechanisms for ethanol and ethanol containing hydrocarbon fuels. Mechanical engineering department. Florianopolis, Brazil, University of Santa Catarina. **Ph.D.**

Chang, A. Y., J. W. Bozzelli and A. M. Dean (2000). "Kinetic analysis of complex chemical activation and unimolecular dissociation reactions using QRRK theory and the modified strong collision approximation." *Zeitschrift Fur Physikalische Chemie-International Journal of Research in Physical Chemistry & Chemical Physics*, **214**: 1533-1568.

Cheng, A., A. Upatnieks and C. Mueller (2006). "Investigation of the impact of biodiesel fuelling on NOx emissions using an optical direct injection diesel engine." *International Journal of Engine Research*, **7** (4): 297-318.

Colket, M. B. and D. J. Seery (1994). "Reaction mechanisms for toluene pyrolysis." *Symposium (International) on Combustion*, **25** (1): 883-891.

Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook (1998). "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation." *Combustion and Flame*, **114** (1-2): 149-177.

Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook (2002). "A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation." *Combustion and Flame*, **129** (3): 253-280.

Dagaut, P. (2002). "On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel." *Physical Chemistry Chemical Physics*, **4** (11): 2079-2094.

Dagaut, P. and M. Cathonnet (2006). "The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling." *Progress in Energy and Combustion Science*, **32** (1): 48-92.

Dagaut, P., M. Cathonnet, J. P. Rouan, R. Foulatier, A. Quilgars, J. C. Boettner, F. Gaillard and H. James (1986). "A Jet-Stirred Reactor for Kinetic-Studies of Homogeneous Gas-Phase Reactions at Pressures up to 10-Atmospheres (~ 1 MPa)." *Journal of Physics E-Scientific Instruments*, **19** (3): 207-209.

Dagaut, P., M. Reuillon and M. Cathonnet (1994). "High Pressure Oxidation of Liquid Fuels from Low to High Temperature. 3. n-Decane." *Combust. Sci. Technol.*, **103**: 349.

DARS Software for Digital Analysis of Reactive Systems. Available from: <http://www.diganars.com/>.

Davidson, D. F., D. C. Horning, J. T. Herbon and R. K. Hanson (2000). "Shock tube measurements of JP-10 ignition." *Proceedings of the Combustion Institute*, **28** (2): 1687-1692.

Davidson, D. F., M. A. Oehlschlaeger, J. T. Herbon and R. K. Hanson (2002). "Shock tube measurements of iso-octane ignition times and OH concentration time histories." *Proceedings of the Combustion Institute*, **29** (1): 1295-1301.

Dayma, G., S. Gail and P. Dagaut (2008). "Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of Methyl Hexanoate." *Energy & Fuels*, **22** (3): 1469-1479.

Dayma, G., R. A. Glaude, R. Fournet and F. Battinleclerc (2003). "Experimental and modeling study of the oxidation of cyclohexene." *Int J Chem Kinet*, **35** (7): 273-285.

Dayma, G., C. Togbé and P. Dagaut (2009). "Detailed kinetic mechanism for the oxidation of vegetable oil methyl esters: New evidence from methyl heptanoate." *Energy & Fuels*.

Dean, A. J., O. G. Penyazkov, K. L. Sevruck and B. Varatharajan (2007). "Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (2): 2481-2488.

Delfau, J.-L., M. Bouhria, M. Reuillon, O. Sanogo, R. Akrich and C. Vovelle (1991). "Experimental and computational investigation of the structure of a sooting decane-O<sub>2</sub>-Ar flame." *Symposium (International) on Combustion*, **23** (1): 1567-1572.

Dievert, P. (2008). Oxydation et combustion en milieu ultra-pauvre de carburants types gazole. Étude expérimentale en réacteur agité et modélisation. Optique et lasers – Physico-chimie – Atmosphère Lille, Thèse de Doctorat, Lille 1.

Doute, C., J. L. Delfau and C. Vovelle (1997). "Modeling of the Structure of a Premixed n-Decane Flame." *Combust. Sci. Technol.*, **130**: 269.

Ec2003 (17.5.2003). "Directive 2003/30/EC of the European Parliament and of the Council of 8 May 2003 on the promotion of the use of biofuels or other renewable fuels for transport." *Official Journal of the European Union L 123/42*, (**European Commission, Brussels**), [http://ec.europa.eu/energy/res/legislation/doc/biofuels/en\\_final.pdf](http://ec.europa.eu/energy/res/legislation/doc/biofuels/en_final.pdf).

Ec2009 (28.4.2009). "Directive 2009/28/EC of the European Parliament and of the Council of 23 April 2009 on the promotion of the use of energy from renewable sources and amending and subsequently repealing Directives 2001/77/EC and 2003/30/EC." *Official Journal of the European Union L 140/16*, (**European Commission, Brussels**), <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2009:140:0088:0113:EN:PDF>.

Embouazza, M., D. C. Haworth and N. Darabiha (2002). "Implementation of Detailed Chemical Mechanisms into Multidimensional CFD Using in situ Adaptive Tabulation: Application to HCCI Engines." *SAE paper no.2002-01-2773. Society of Automotive Engineers Inc.*

Emdee, J. L., K. Brezinsky and I. Glassman (1992). "A Kinetic-Model for the Oxidation of Toluene near 1200-K." *Journal of Physical Chemistry*, **96** (5): 2151-2161.

ENERS, E. C. (2009). Production de biocarburants dans le monde. Chifres 2009. P. Biocarburants.

EurObserv'ER (2010). ÉTAT DES ÉNERGIES RENOUVELABLES EN EUROPE. **édition2010.**

Farrell, J. T., N. P. Cernansky, F. L. Dryer, D. G. Friend, C. A. Hergart, C. K. Law, R. M. McDavid, C. J. Mueller, A. K. Patel and H. Pitsch (2007). "Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Diesel Fuels." *SAE International* (2007-01-0201).

Fikri, M., J. Herzler, R. Starke, C. Schulz, P. Roth and G. T. Kalghatgi (2008). "Autoignition of gasoline surrogates mixtures at intermediate temperatures and high pressures." *Combustion and Flame*, **152** (1-2): 276-281.

Fisher, E. M., W. J. Pitz, H. J. Curran and C. K. Westbrook (2000). "Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels." *Symposium (International) on Combustion*, **28** (2): 1579-1586.

Gaïl, S., S. M. Sarathy, M. J. Thomson, P. Diévert and P. Dagaut (2008). "Experimental and chemical kinetic modeling study of small methyl esters oxidation: Methyl (E)-2-butenate and methyl butanoate." *Combustion and Flame*, **155** (4): 635-650.

Gaïl, S., M. J. Thomson, S. M. Sarathy, S. A. Syed, P. Dagaut, P. Diévert, A. J. Marchese and F. L. Dryer (2007). "A wide-ranging kinetic modeling study of methyl butanoate combustion." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1): 305-311.

Gelfand, B. E. (2000). "APPENDIX A : Laminar and turbulent flame propagation in hydrogen – Air – Steam mixtures ; (Part of : Flame Acceleration and Deflagration to Detonation Transition in Nuclear Safety) " *OECD Nuclear Energy Agency - NEA/CSNI/R(2000)7.*

Glaude, P. A., W. J. Pitz and M. J. Thomson (2005). "Chemical kinetic modeling of dimethyl carbonate in an opposed-flow diffusion flame." *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1): 1111-1118.

Gou, X., W. Sun, Z. Chen and Y. Ju (2010). "A dynamic multi-timescale method for combustion modeling with detailed and reduced chemical kinetic mechanisms." *Combustion and Flame*, **157** (6): 1111-1121.

Griffiths, J. F. and J. A. Barnard (1995). Flame and Combustion. B. A. Professional. Glasgow: 94-142.

HadjAli, K., M. Crochet, G. Vanhove, M. Ribaucour and R. Minetti (2009). "A study of the low temperature autoignition of methyl esters." *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1): 239-246.

Hartmann, M., K. Tian, C. Hofrath, M. Fikri, A. Schubert, R. Schießl, R. Starke, B. Atakan, C. Schulz, U. Maas, F. Kleine Jäger and K. Kühling (2009). "Experiments and modeling of ignition delay times, flame structure and intermediate species of EHN-doped stoichiometric n-heptane/air combustion." *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1): 197-204.

Herbinet, O., W. J. Pitz and C. K. Westbrook (2008). "Detailed chemical kinetic oxidation mechanism for a biodiesel surrogate." *Combustion and Flame*, **154** (3): 507-528.

Herbinet, O., W. J. Pitz and C. K. Westbrook (2010). "Detailed chemical kinetic mechanism for the oxidation of biodiesel fuels blend surrogate." *Combustion and Flame*, **157** (5): 893-908.

Herzler, J., M. Fikri, K. Hitzbleck, R. Starke, C. Schulz, P. Roth and G. T. Kalghatgi (2007). "Shock-tube study of the autoignition of n-heptane/toluene/air mixtures at intermediate temperatures and high pressures." *Combustion and Flame*, **149** (1-2): 25-31.

Horning, D. C., D. F. Davidson and R. K. Hanson (2002). "Study of the high-temperature autoignition of n-alkane/O<sub>2</sub>/Ar mixtures." *Journal of Propulsion and Power*, **18** (2): 363-371.

Ji, C., E. Dames, Y. L. Wang, H. Wang and F. N. Egolfopoulos (2010). "Propagation and extinction of premixed C<sub>5</sub>-C<sub>12</sub> n-alkane flames." *Combustion and Flame*, **157** (2): 277-287.

Kalscheuer, R., T. Stolting and A. Steinbuchel (2006). "Microdiesel: *Escherichia coli* engineered for fuel production." *Microbiology*, **152**: 2529-2536.

Kiefer, J. H., L. J. Mizerka, M. R. Patel and H. C. Wei (1985). "A shock tube investigation of major pathways in the high-temperature pyrolysis of benzene." *The Journal of Physical Chemistry*, **89** (10): 2013-2019.

Klippenstein, S. J., J. A. Miller and L. B. Harding (2002). "Resolving the mystery of prompt CO<sub>2</sub>: The HCCO+O<sub>2</sub> reaction." *Proceedings of the Combustion Institute*, **29** (1): 1209-1217.

Kumar, K., J. E. Freeh, C. J. Sung and Y. Huang (2007). "Laminar flame speeds of preheated iso-octane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> and n-heptane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> mixtures." *Journal of Propulsion and Power*, **23** (2): 428-436.

Kumar, K. and C.-J. Sung (2007). "Laminar flame speeds and extinction limits of preheated n-decane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> and n-dodecane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> mixtures." *Combustion and Flame*, **151** (1-2): 209-224.

Kuprowicz, N. J., J. S. Ervin and S. Zabarnick (2004). "Modeling the liquid-phase oxidation of hydrocarbons over a range of temperatures and dissolved oxygen concentrations with pseudo-detailed chemical kinetics." *Fuel*, **83** (13): 1795-1801.

Lamoureux, N., N. Djebaili-Chaumeix and C. E. Paillard (2003). "Laminar flame velocity determination for H<sub>2</sub>-air-He-CO<sub>2</sub> mixtures using the spherical bomb method." *Experimental Thermal and Fluid Science*, **27** (4): 385-393.

Le Cong, T. (2007). Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de combustibles gazeux: méthane, gaz naturel et mélanges contenant de l'hydrogène, du monoxyde de carbone et de l'eau. Orléans, Université d'Orléans. **Dr.**

Litzinger, T. A., K. Brezinsky and I. Glassman ((1985)). Preliminary Experiments with 1-Methylnaphthalene Near 1180 K. presented at The Technical Meeting of The Eastern Section of The Combustion Institute, Fall, Paper # 68.

Lu, T., Y. Ju and C. K. Law (2001). "Complex CSP for chemistry reduction and analysis." *Combustion and Flame*, **126** (1-2): 1445-1455.

Lutz, A. E., R. J. Kee and J. A. Miller (1987). Senkin: A Fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis. SAND87-8248. Livermore, CA, Sandia National Laboratories.

Maas, U. and S. B. Pope (1992). "Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space." *Combustion and Flame*, **88** (3-4): 239-264.

Marchal, A. (1997). Etude de la combustion des familles chimiques constitutives des gazoles à la formation de polluants non réglementés. Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**

Marinov, N. M., W. J. Pitz, C. K. Westbrook, M. J. Castaldi and S. M. Senkan (1996). "Modeling of aromatic and polycyclic aromatic hydrocarbon formation in premixed methane and ethane flames." *Combustion Science and Technology*, **116** (1-6): 211-287.

Mati, K. (2000). Cinétique de combustion du gazole a haute pression: étude expérimentale et modélisation, University of Orléans.

Mati, K., A. Ristori, S. Gail, G. Pengloan and P. Dagaut (2007). "The oxidation of a diesel fuel at 1-10 atm: Experimental study in a JSR and detailed chemical kinetic modeling." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (2): 2939-2946.

Mati, K., A. Ristori, G. Pengloan and P. Dagaut (2007). "Oxidation of 1-methylnaphthalene at 1-13 atm: Experimental study in a JSR and detailed chemical kinetic modeling." *Combustion Science and Technology*, **179** (7): 1261-1285.

Metcalf, W. K., C. Togbé, P. Dagaut, H. J. Curran and J. M. Simmie (2009). "A jet-stirred reactor and kinetic modeling study of ethyl propanoate oxidation." *Combustion and Flame*, **156** (1): 250-260.

Mikolajczak, C. J., M. J. Wornat, F. L. Dryer, O. B. Fringer and T. J. Held (1996). "A flow reactor study of 1-methylnaphthalene pyrolysis using a new condensed species sampling probe." *Chem. Phys. Processes Combust.*, **51**: 183.

- Mosconi, J. J. (2006). "Transport: quelles alternatives énergétiques?" *Université TOTAL*.
- Muller, C., V. Michel, G. Scacchi and G. M. Come (1995). "THERGAS: A computer program for the evaluation of thermochemical data of molecules and free radicals in the gas phase." *J Chim Phys Phys-Chim Biol*, **92** (5): 1154-1178.
- Narayanaswamy, K., G. Blanquart and H. Pitsch (2010). "A consistent chemical mechanism for oxidation of substituted aromatic species." *Combustion and Flame*, **157** (10): 1879-1898.
- Oertel, H., Stoßrohre and Springer-Verlag (1966). "New York."
- Oilgae (Report 2011). Oilgae Comprehensive Report. Energy from Algae: Products, Market, Processes and Strategies. O. <http://www.oilgae.com/ref/report/report.html>; February 2011.
- Olchanski, E. and A. Burcat (2006). "Decane oxidation in a shock tube." *International Journal of Chemical Kinetics*, **38** (12): 703-713.
- Osmont, A. (2007). Elaboration d'une méthode théorique de calcul des enthalpies de formation en phase gazeuse et condensée des molécules et radicaux de masse molaire élevée- Application à l'énergétique-Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**.
- Palmer, H. B., B. E. Kno and (1961). *ARS J.*, **31**: 826-828.
- Pfahl, U. and G. Adomeit (1997). "Self-Ignition of Diesel-Engine Model Fuels At High Pressures." *SAE Technical Paper 970897*, **106** (3).
- Pfahl, U., K. Fieweger and G. Adomeit (1996). "Self-ignition of diesel-relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions." *Symposium (International) on Combustion*, **26** (1): 781-789.
- Pitsch, H. (1996). "Detailed kinetic reaction mechanism for ignition and oxidation of [alpha]-methylnaphthalene." *Symposium (International) on Combustion*, **26** (1): 721-728.
- Prévoit, H., V. Hespel, J. Y. Dupré, F. Baratin and D. Gagey (2005). Rapport sur L'optimisation du dispositif de soutien à la filière biocarburants: 5-12.
- Prieur-Vernat, A. and S. His (2007). "Les biocarburants dans le monde." *IFP:Panorama07*.
- Qiao, L., W. Dahm and G. M. Faeth (2008). "Burning Velocities and Flammability Limits of Premixed Methane/Air/Diluent Flames in Microgravity." *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, **AIAA 2008-959**: 1-9.
- Ramirez L, H. P., K. Hadj-Ali, P. Diévert, G. Moréac and P. Dagaut (2010). "Kinetics of Oxidation of Commercial and Surrogate Diesel Fuels in a Jet-Stirred Reactor: Experimental and Modeling Studies." *Energy & Fuels*, **24** (3): 1668-1676.
- Ranzi, E., P. Gaffuri, T. Faravelli and P. Dagaut (1995). "A wide-range modeling study of n-heptane oxidation." *Combustion and Flame*, **103** (1-2): 91-106.

- Reich, L. and S. S. Stivala (1969). "Autoxidation of Hydrocarbons and Polyolefins - Kinetics and Mechanism." *Decker, New York*: 101 - 109.
- Ristori, A. (2000). Modélisation de la combustion du gazole étude des aspects chimiques. Laboratoire ICARE Orléans, Université d'Orléans. **Thèse de doctorat**.
- Ristori, A. (2000). Modélisation de la combustion du gazole. Etude des aspects chimiques. Cinétique Chimique. Orléans, Université d'Orléans. **Docteur**.
- Sarathy, S. M., S. Gail, S. A. Syed, M. J. Thomson and P. Dagaut (2007). "A comparison of saturated and unsaturated C4 fatty acid methyl esters in an opposed flow diffusion flame and a jet stirred reactor." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1): 1015-1022.
- Sato, K. and Y. Hidaka (2000). "Shock-tube and modeling study of acetone pyrolysis and oxidation." *Combust Flame*, **122** (3): 291-311.
- Schönborn, A. (2009). Influence of the molecular structure of biofuels on combustion in a compression ignition engine. Department of Mechanical Engineering. London, University College London. **Doctor of Philosophy**.
- Schönborn, A., N. Ladommatos, J. Williams, R. Allan and J. Rogerson (2009). "The influence of molecular structure of fatty acid monoalkyl esters on diesel combustion." *Combustion and Flame*, **156** (7): 1396-1412.
- Scott, M. and R. W. Walker (2002). "Addition of toluene and ethylbenzene to mixtures of H-2 and O-2 at 773 K - Part I: Kinetic measurements for H and HO2 reactions with the additives and a data base for H abstraction by HO2 from alkanes, aromatics and related compounds." *Combustion and Flame*, **129** (4): 365-377.
- Shaddix, C. R., K. Brezinsky and I. Glassman (1997). "Analysis of fuel decay routes in the high-temperature oxidation of 1-methylnaphthalene." *Combustion and Flame*, **108**: 139-157.
- Silke, E. J., W. J. Pitz, C. K. Westbrook and M. Ribaucour (2007). "Detailed chemical kinetic modeling of cyclohexane oxidation." *Journal of Physical Chemistry a*, **111** (19): 3761-3775.
- Siva Kumara, A., D. Maheswarb and V. K. Reddyc (2009). "Comparison of Diesel Engine Performance and Emissions from Neat and ransesterified Cotton Seed Oil." *Jordan Journal of Mechanical and Industrial Engineering*, **3** (3): 190-197.
- Skjoth-Rasmussen, M. S., M. Braun-Unkhoff, C. Nauman and P. Frank (2003). "Experimental and numerical study of n-decane chemistry." *Proceedings of the European Combustion Meeting*.
- Su, W. and H. Huang (2005). "Development and calibration of a reduced chemical kinetic model of n-heptane for HCCI engine combustion." *Fuel*, **84** (9): 1029-1040.
- Sun, W., Z. Chen, X. Gou and Y. Ju (2010). "A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms." *Combustion and Flame*, **157** (7): 1298-1307.



Tang, Q. and S. B. Pope (2002). "Implementation of combustion chemistry by in situ adaptive tabulation of rate-controlled constrained equilibrium manifolds." *Proceedings of the Combustion Institute*, **29** (1): 1411-1417.

The Royal Society (2008). *Sustainable biofuels: prospects and challenges*. T. b. T. C. P. Ltd. Cardiff, UK, : 35-36.

Togbé, C., J. B. May-Carle, G. Dayma and P. Dagaut (2009). "Chemical Kinetic Study of the Oxidation of a Biodiesel–Bioethanol Surrogate Fuel: Methyl Octanoate–Ethanol Mixtures†." *The Journal of Physical Chemistry A*, **114** (11): 3896-3908.

Tsang, W. (1978). "Evidence for Strongly Temperature-Dependent Factors in Alkane Decomposition and High Heats of Formation for Alkyl Radicals." *International Journal of Chemical Kinetics*, **10** (8): 821-837.

Tsang, W. (1988). "Chemical Kinetic Data-Base for Combustion Chemistry .3. Propane." *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **17** (2): 887-952.

Vanhove, G., R. Minetti, S. Touchard, R. Fournet, P. A. Glaude and F. Battin-Leclerc (2006). "Experimental and modeling study of the autoignition of 1-hexene/isooctane mixtures at low temperatures." *Combustion and Flame*, **145** (1-2): 272-281.

Vasudevan, V., D. F. Davidson and R. K. Hanson (2005). "Shock tube measurements of toluene ignition times and OH concentration time histories." *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1): 1155-1163.

Wang, H., S. J. Warner, M. A. Oehlschlaeger, R. Bounaceur, J. Biet, P.-A. Glaude and F. Battin-Leclerc (2010). "An experimental and kinetic modeling study of the autoignition of [alpha]-methylnaphthalene/air and [alpha]-methylnaphthalene/n-decane/air mixtures at elevated pressures." *Combustion and Flame*, **157** (10): 1976-1988.

Warth, V., N. Stef, P. A. Glaude, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi and G. M. Come (1998). "Computer-Aided Derivation of Gas-Phase Oxidation Mechanisms: Application to the Modeling of the Oxidation of n-Butane." *Combustion and Flame*, **114** (1-2): 81-102.

Yahyaoui, M. (2005). Étude cinétique de la formation de polluants à partir de mélanges représentatifs des essences, Université d'Orléans.

Yahyaoui, M., N. Djebaili-Chaumeix, P. Dagaut, C. E. Paillard and S. Gail (2007). "Experimental and modelling study of gasoline surrogate mixtures oxidation in jet stirred reactor and shock tube." *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1): 385-391.

Yahyaoui, M., N. Djebaili-Chaumeix, P. Dagaut, C. E. Paillard, B. Heyberger and G. Pengloan (2007). "Ignition and oxidation of 1-Hexene/Toluene mixtures in a shock tube and a jet-stirred reactor: Experimental and kinetic modeling study." *International Journal of Chemical Kinetics*, **39** (9): 518-538.

Zabarnick, S. (1993). "Chemical kinetic modeling of jet fuel autoxidation and antioxidant chemistry." *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **32** (6): 1012-1017.

Zabarnick, S. (1998). "Pseudo-Detailed Chemical Kinetic Modeling of Antioxidant Chemistry for Jet Fuel Applications." *Energy & Fuels*, **12** (3): 547-553.

Zeppieri, S. P., S. D. Klotz and F. L. Dryer (2000). "Modeling Concepts for Larger Carbon Number Alkanes: a Partially Reduced Skeletal Mechanism for n-Decane Oxidation and Pyrolysis." *Twenty-Eighth Symposium (International) on Combustion.*: 1587.

Zhang, H. X., S. I. Ahonkhai and M. H. Back (1998). "Rate constants for abstraction of hydrogen from benzene, toluene, and cyclopentane by methyl and ethyl radical over the temperature range 650-770 K." *Can. J. Chem.*, **67**: 1541.

Zhang, Y., Y. Yang and A. L. Boehman (2009). "Premixed ignition behavior of C9 fatty acid esters: A motored engine study." *Combustion and Flame*, **156** (6): 1202-1213.

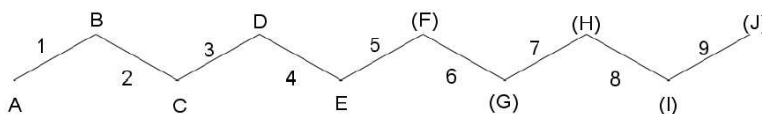
Zhao, Z. W., J. Li, A. Kazakov, F. L. Dryer and S. P. Zeppieri (2005). "Burning velocities and a high-temperature skeletal kinetic model for n-decane." *Combustion Science and Technology*, **177** (1): 89-106.

Zhukov, V. P., V. A. Sechenov and A. Y. Starikovskii (2008). "Autoignition of n-decane at high pressure." *Combustion and Flame*, **153** (1-2): 130-136.

# Annexe 1

## Nomenclature methodology

In this study, the nomenclature used for the oxidation mechanism of *n*-alkanes follows the same methodology adopted by Diévert *et al.* [1]. It consists to give to each carbon atom of the starting molecule a letter (written in capitals) and a number to each carbon-carbon bond. Some examples for the case of *n*-decane are represented above (Fig. 1). Then each function or functional group was represented in most of cases by a letter or group of letters (lower case), as used by Curran [2]. Some examples of this nomenclature are shown in Table 1 for clarity.



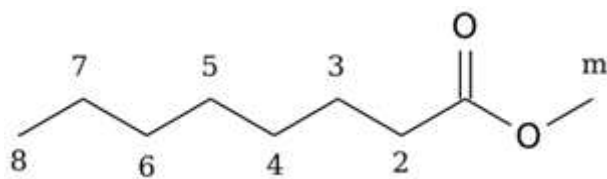
**Fig. 1.** Example of the nomenclature used in this kinetic mechanism for *n*-decane.

**Table 1.** Nomenclature for radicals obtained from *n*-decane oxidation.

Name	species
nc10h22	
Ac10h21	
Bc10H21	
Cc10h21	
Dc10h21	
Ec10h21	
c10h20-3	
c10h21ojB	
c10h20rGqD	
c10h20o-BE	
c10h20qjEqC	
c10h19oCqD	

The nomenclature used for the oxidation of methyl esters follows that adopted by Fischer *et al.* [3] and Dayma *et al.* [4]. Thus, the methodology consists to give to each carbon of the molecule a number (Fig. 2). The position of a radical is denoted by the position of radical

(carbon atom) followed by "j". Some examples of species obtained from methyl octanoate oxidation are given in Table 2. The same methodology was used for all methyl esters studied.



**Fig. 2.** Example of the nomenclature used in this kinetic mechanism for methyl octanoate.

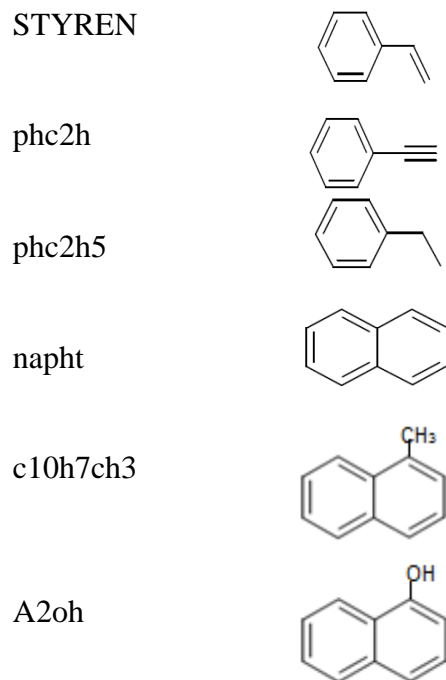
**Table 2.** Nomenclature for radicals obtained from methyl octanoate oxidation.

Name	Species
mo5j	
mo3d	
mo7oo	
mo3ooh5j	
mocy8o6	
mo2oohm*o	

Concerning the nomenclature used for aromatic species, we follow the methodology of Mati *et al.*[5], which consists to use the name of the molecule or functional group. Some examples are given in the Table 3.

**Table 3.** Some examples of aromatic species used in this work.

Name	species
c6h6	
c6h5oh	
phch2	
phco	
c6h5o	



### References

1. Dievert, P. Oxydation et combustion en milieu ultra-pauvre de carburants types gazole. Étude expérimentale en reacteur agité et modélisation. Université de Lille 1, Lille, 2008.
2. Curran, H. J.; Gaffuri, P.; Pitz, W. J.; Westbrook, C. K., A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation. *Combust. Flame* **2002**, *129* (3), 253-280.
3. Fisher, E. M.; Pitz, W. J.; Curran, H. J.; Westbrook, C. K., Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. *Proc. Combust. Inst.* **2000**, *28*, 1579-1586.
4. Dayma, G.; Gail, S.; Dagaut, P., Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate. *Energy Fuels* **2008**, *22* (3), 1469-1479.
5. Mati, K.; Ristori, A.; Pengloan, G.; Dagaut, P., Oxidation of 1-methylnaphthalene at 1-13 atm: Experimental study in a JSR and detailed chemical kinetic modeling. *Combust. Sci. Technol.* **2007**, *179* (7), 1261-1285.



## *Annexe 2*

### **Mécanisme cinétique**





\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*  
!\*\*\* mecanisme d'oxydation du \*\*\*  
!\*\*\*n-décane - 1-méthylnaphtalene-Methyl Octanoate \*\*\*  
!\*\*\* RAMIREZ DIEVART TOGBE \*\*\*  
!\*\*\* ICARE \*\*\*  
!\*\*\* Octobre 2011 \*\*\*  
!\*\*\*\*\*  
\*\*\*\*\*

ELEMENTS  
c/12.012/  
h/1.00757/  
o/15.9994/  
N/14.0067/  
AR/39.9500/

SPECIES

!espèces dosées  
c2 co c2h2 h2 h2o  
c4 c2h6 c2h4 c3h6 c4h8  
c5h10 c6h12-1 c7h14-1 c8h16-1 c9h18-1  
c10h20-1 c11h22 c12h24-1 c6h14 nc7h16 nc12h26  
c3h8 c4h10 nc5h12 nc11h24  
nc8h18 nc9h20 nc10h22 nc11h24  
c2h2 c4h6 ac3h4 pc3h4 acro1  
ch2c ch3co ethcco aceton nc3h7cco mvk  
nc4h9hcco c5h11hcco c6h13hcco aceton  
c2h5coco2h3 c5h11hcco c2h4o  
ch3ch c2h5oh c2h4o  
c6h6 toluen phc2h5 styren c6h5oh  
phhco c5h4o c2h4o napht CPD  
c5h4oh  
c10h20o-AD c10h20o-BE c10h20o-CF c10h20o-CD c10h20o-DE  
c10h20o-DG c10h20o-AB c10h20o-BC c10h20o-CE c10h20o-DF  
c10h20o-EF c10h20o-AC c10h20o-BD c10h20o-CE  
c10h20o-AE c10h20o-BF c10h20o-CG c10h20o-4 c10h20o-5  
c10h20o-2 c10h20o-3  
cyc6h12 cyc6h10 mche1 chxone chxe2oA  
chxe3oA che24one  
c10h7ch3 c10h7hcco indene mp2d mb mb2d  
mb3d  
mpe mpe4d mpe3d mpe2d mhx2d mhp3d mhp2d  
mxx mhx5d mhx4d mhx3d mhx2d mhp3d mhp2d  
mhp mhp6d mhp5d mhp4d mhp3d mhp2d  
mo mo7d mo6d mo5d mo4d mo3d  
mo2d  
mo8\*o mhp7\*o mhx6\*o mpe5\*o mb4\*o mp3\*o me2  
\*o  
! Base C0  
h2 o2 h h2o2 o oh  
ho2 h2o h2o2  
n2 ar  
! Base C1  
co co2 ch2 sch2 ch  
ch4 ch3

C  
ch3oh ch3o ch2oh ch2o hco  
ch3o2 ch3o2h o2cho ho2cho ocho  
! Base c2  
c2h6 c2h5 c2h4 c2h3 c2h2  
c2h c2o c2h2hco ch2co hcco  
ch3hcco ch3co ch2hco ch3co3h ch3coo3h hcco  
c2h5oh c2h5o c2h5o2 c2h5o2h  
c2h4o c2h4o2h c2h2oh  
hccoh chocho c2h3o  
pc2h4oh o2c2h4oh ch3choh

! Base C3

c3h8 nc3h7 ic3h7 c3h5 sc3h5  
pc3h4 ac3h5 tc3h5 c3h2 c3h2  
nc3h7o nc3h7o nc3h7o2 nc3h7o2h  
ic3h7o ic3h7o2 ic3h7o2h c3h6ooh1-1 c3h6ooh1-1  
c3h6ooh1-2 c3h6ooh1-3 c3h6ooh2-1 c3h6ooh2-1  
c3h6ooh1-2o2 c3h6ooh1-3o2 c3h6ooh2-1o2 c3h6ooh1-1o2  
c3ket12 c3ket13 c3ket21 c3h5o  
c3h6o c3h6o1-3 c3h6o1-3  
c3h4oh c3h4o2h c3h4o2h c3h3o  
c3h5o2h c3h5e1q2 c3h5o  
ethcco c2h5co c2h5co3h c2h5co2  
aceton acrol c2h3co ch2coco3  
ch35oh c3h6oh c2c3h6oh ch3chcco  
ch2ch2hcco o2c2h4hcco ho2c2h4hcco oc2h4hcco  
ch3cocho ch3cocco ch2cococho hcoch2hcco hcoch2co  
propynal ch3cocho2o ch3cocho2o  
c2hcco

! Base C4

ic4h9 tc4h9 ic4h8 ic4h7  
c4h4o c3h4hcco c3h3hcco c3h3co  
c4h10 pc4h9 sc4h9 c4h8  
c2c4h8 Ac4h7-1 Cc4h7-1 Dc4h7-1  
butyne butyn2 meall ic4h5  
nc4h5 c4h4 nc4h3 ic4h3  
c4h9qjA c4h9qjB c4h8rCqA c4h8rDqA  
c4h8rAgA c4h8rBqA c4h8rCqB c4h8rDqB  
c4h8qjAgA c4h8qjBgA c4h8qjCqB c4h8qjDqB  
c4h8o43 c4h8o44 c4h8o45 c4h8o46  
c4h7oAgB c4h7oAgC c4h7oAgD c4h7oAgE  
c4h7oBqC c4h7oBqD c4h7oBqE c4h7oBqF  
nc4h9o2h c4h7o2h c4h7e1qB c4h7oq  
nc3h7hcco ac3h7co ac3h5hcco c3h7co3h  
c4h7oh butanone mvk c2h3chcco  
c4h8o2h hhd h2c4o c4h  
c4h6o2h hoc4h6 ch3chch2hcco c4h  
c3h6cho-1 ch3coc2h4o2 ch3coc2h4o2h ch3coc2h4o  
ch3coc2h4p c2h5coco2o2 c2h5coco2o2h c2h5coco2o  
c2h5coco2 c4h7hcco-1 c4h7co-1 c2h5coco2h  
c4h8hcco-2 c4h7hcco-2 c4h7co-2

! Base C5

nc5h12 Bc5h11 Cc5h11 Ac5h9-1 Ec5h9-1  
Ac5h11 c2c5h10 t2c5h10 Ec5h9-1 Ec5h9-1  
c5h10 Cc5h9-1 Dc5h9-1 Ec5h9-1 Dc5h9-2  
Bc5h9-1 Cc5h9-1 Dc5h9-1 Ec5h9-1  
c5h11qjA c5h11qjB c5h11qjC c5h11qjD  
c5h10rAgA c5h10rBgA c5h10rCqA c5h10rDqA c5h10rEqA  
c5h10rAgB c5h10rBgB c5h10rCqB c5h10rDqB c5h10rEqB  
c5h10rAgC c5h10rBgC c5h10rCqC c5h10rDqC c5h10rEqC  
c5h10qjAgA c5h10qjBgA c5h10qjCqA c5h10qjDqA c5h10qjEqA  
c5h10qjAgB c5h10qjBgB c5h10qjCqB c5h10qjDqB c5h10qjEqB  
c5h10qjAgC c5h10qjBgC c5h10qjCqC c5h10qjDqC c5h10qjEqC  
c5h9oAgA c5h9oBgA c5h9oCqA c5h9oDqA c5h9oEqA  
c5h9oAgB c5h9oBgB c5h9oCqB c5h9oDqB c5h9oEqB  
c5h9oCqC c5h9oDqC c5h9oEqC  
c5h10o#3 c5h10o#4 c5h10o#5 c5h10o#6  
Ac5h9o#5 Dc5h9o#5  
nc5h11o2h c5h9o2h c5h9e2qC  
nc4h9hcco nc4h9cco  
c3h7coch3 nc3h7coch2 nc3h7coch2o2 nc3h7coch2o2 nc3h7coch2o  
nc3h7coch2-1 c3h6coch3-2 c3h6coch3-3 c3h6coch3-3  
c3h6coch3-1 c3h6coch3-2 c3h6coch3-3  
c2h5coco2h5 c2h5coco2h4o2 c2h5coco2h4o2h c2h5coco2h4o  
c2h5coco2h4p pc2h4coc2h3 sc2h4coc2h3 divinket  
c2h5coco2h4s c2h5coco2h4s  
c2h5coco2h3 pc2h4coc2h3 sc2h4coc2h3 divinket  
c5h9oh c5h8-12 c5h8-13 c5h8-14 c5h7  
c5h8-12 c5h8-13 c5h8-14 c5h7  
ch3coc3h6o2-1 ch3coc3h6o2h-1 ch3coc3h6o-1  
isoph isope isopy

! espèces en C6

c6h14 Ac6h13 Bc6h13 Cc6h13 Ac6h11-3 Ec6h11-3  
c6h12-1 c6h12-2 c6h12-3 c6h12-3 Bc6h11-3  
Cc6h11-1 Fc6h11-1 Ac6h11-3 c6h9  
c6h10-13 c6h10-15 c6h10-15 c6h9  
c6h13qjA c6h13qjB c6h13qjC c6h13qjD  
c6h13qA c6h13qB c6h13qC c6h13qD  
c6h13oqjA c6h13oqjB c6h13oqjC c6h13oqjD  
c6h12rAgA c6h12rBgA c6h12rCqA c6h12rDqA c6h12rEqA  
c6h12rAgB c6h12rBgB c6h12rCqB c6h12rDqB c6h12rEqB  
c6h12rAgC c6h12rBgC c6h12rCqC c6h12rDqC c6h12rEqC  
c6h12qjAgA c6h12qjBgA c6h12qjCqA c6h12qjDqA c6h12qjEqA  
c6h12qjAgB c6h12qjBgB c6h12qjCqB c6h12qjDqB c6h12qjEqB  
c6h12qjAgC c6h12qjBgC c6h12qjCqC c6h12qjDqC c6h12qjEqC  
c6h11oAgA c6h11oBgA c6h11oCqA c6h11oDqA c6h11oEqA  
c6h11oAgB c6h11oBgB c6h11oCqB c6h11oDqB c6h11oEqB  
c6h11oCqC c6h11oDqC c6h11oEqC  
c6h11oCqA c6h11oCqB c6h11oCqC c6h11oCqD c6h11oCqE  
c6h12o-AB c6h12o-BC c6h12o-CD c6h12o-AC  
c6h12o-AD c6h12o-AE c6h12o-AE c6h12o-AC  
c5h11hcco c5h11cco hexanone

! Base C7

nc7h16 Ac7h15 Bc7h15 Cc7h15 Dc7h15 Ec7h15-1  
c7h14-1 c7h14-2 c7h14-3 c7h12-13 c7h12-16  
Cc7h13-1 Dc7h13-1 Ac7h13-3 c7h15qjD  
c7h15qjA c7h15qjB c7h15qjC c7h15qjD

c7h14rBgA c7h14rCgA c7h14rDqA c7h14rEqA c7h14rFgB  
c7h14rAgB c7h14rCgB c7h14rDqB c7h14rEqB c7h14rFgC  
c7h14rAgC c7h14rBqC c7h14rDqC c7h14rEqC c7h14rFgC  
c7h14rAgD c7h14rBqD c7h14rDqD c7h14rEqD c7h14rFgC  
c7h14qjBgA c7h14qjCqA c7h14qjDqA c7h14qjEqA c7h14qjFgB  
c7h14qjAgB c7h14qjBgB c7h14qjCqB c7h14qjDqB c7h14qjEqB  
c7h14qjAgC c7h14qjBgC c7h14qjCqC c7h14qjDqC c7h14qjEqC  
c7h14qjAgD c7h14qjBgD c7h14qjCqD c7h14qjDqD c7h14qjEqD  
c7h14o-AB c7h14o-BC c7h14o-CD c7h14o-AC c7h14o-BD  
c7h14o-CE c7h14o-AD c7h14o-BE c7h14o-AE c7h14o-BF  
c7h15qC c7h15qD c7h15qE c7h15qF c7h15qG  
c7h15oA c7h15oB c7h15oC c7h15oD c7h15oE  
c7h13oAgA c7h13oBgA c7h13oCqA c7h13oDqA c7h13oEqA  
c7h13oAgB c7h13oBgB c7h13oCqB c7h13oDqB c7h13oEqB  
c7h13oCqC c7h13oDqC c7h13oEqC  
c6h13hcco c6h13cco c6h13cco  
c6h11hcco c6h11cco c6h11cco  
P2c4h614 P2c4h513 P2c4h4134

! Base C8

nc8h18 Ac8h17 Bc8h17 Cc8h17 Dc8h17 Ec8h16-4  
c8h16-1 c8h16-2 c8h16-3 c8h16-4  
c8h14 Cc8h15-1 Hc8h15-1  
c8h17qjA c8h17qjB c8h17qjC c8h17qjD  
c8h16rAgA c8h16rBgA c8h16rCqA c8h16rDqA c8h16rEqA  
c8h16rAgB c8h16rBgB c8h16rCqB c8h16rDqB c8h16rEqB  
c8h16rAgC c8h16rBgC c8h16rCqC c8h16rDqC c8h16rEqC  
c8h16rAgD c8h16rBgD c8h16rCqD c8h16rDqD c8h16rEqD  
c8h16rAgE c8h16rBgE c8h16rCqE c8h16rDqE c8h16rEqE  
c8h16rAgF c8h16rBgF c8h16rCqF c8h16rDqF c8h16rEqF  
c8h16rAgG c8h16rBgG c8h16rCqG c8h16rDqG c8h16rEqG  
c8h16rAgH c8h16rBgH c8h16rCqH c8h16rDqH c8h16rEqH  
nc8h17o2h c8h15oAgA c8h15oAgB c8h15oAgC c8h15oAgD  
c8h15oBgA c8h15oBgB c8h15oBgC c8h15oBgD c8h15oBgE  
c8h15oCqA c8h15oCqB c8h15oCqC c8h15oCqD c8h15oCqE  
c8h15oDqA c8h15oDqB c8h15oDqC c8h15oDqD c8h15oDqE  
c8h15oEqA c8h15oEqB c8h15oEqC c8h15oEqD c8h15oEqE  
c7h15hcco c7h15cco octanone

! Base C9

nc9h20 Ac9h19 Bc9h19 Cc9h19 Dc9h19 Ec9h19  
c9h18-1 c9h18-2 c9h18-3 c9h18-4  
Cc9h17-1 Dc9h17-1 Ec9h17-1 Fc9h17-1 Gc9h17-1  
c9h19qjA c9h19qjB c9h19qjC c9h19qjD c9h19qjE  
c9h18rAgA c9h18rBgA c9h18rCqA c9h18rDqA c9h18rEqA  
c9h18rAgB c9h18rBgB c9h18rCqB c9h18rDqB c9h18rEqB  
c9h18rAgC c9h18rBgC c9h18rCqC c9h18rDqC c9h18rEqC  
c9h18rAgD c9h18rBgD c9h18rCqD c9h18rDqD c9h18rEqD  
c9h18rAgE c9h18rBgE c9h18rCqE c9h18rDqE c9h18rEqE  
c9h18rAgF c9h18rBgF c9h18rCqF c9h18rDqF c9h18rEqF  
c9h18rAgG c9h18rBgG c9h18rCqG c9h18rDqG c9h18rEqG  
c9h18rAgH c9h18rBgH c9h18rCqH c9h18rDqH c9h18rEqH  
c9h18rAgI c9h18rBgI c9h18rCqI c9h18rDqI c9h18rEqI  
c9h18rAgJ c9h18rBgJ c9h18rCqJ c9h18rDqJ c9h18rEqJ  
c9h18rAgK c9h18rBgK c9h18rCqK c9h18rDqK c9h18rEqK  
c9h18rAgL c9h18rBgL c9h18rCqL c9h18rDqL c9h18rEqL  
c9h18rAgM c9h18rBgM c9h18rCqM c9h18rDqM c9h18rEqM  
c9h18rAgN c9h18rBgN c9h18rCqN c9h18rDqN c9h18rEqN  
c9h18rAgO c9h18rBgO c9h18rCqO c9h18rDqO c9h18rEqO  
c9h18rAgP c9h18rBgP c9h18rCqP c9h18rDqP c9h18rEqP  
c9h18rAgQ c9h18rBgQ c9h18rCqQ c9h18rDqQ c9h18rEqQ  
c9h18rAgR c9h18rBgR c9h18rCqR c9h18rDqR c9h18rEqR  
c9h18rAgS c9h18rBgS c9h18rCqS c9h18rDqS c9h18rEqS  
c9h18rAgT c9h18rBgT c9h18rCqT c9h18rDqT c9h18rEqT  
c9h18rAgU c9h18rBgU c9h18rCqU c9h18rDqU c9h18rEqU  
c9h18rAgV c9h18rBgV c9h18rCqV c9h18rDqV c9h18rEqV  
c9h18rAgW c9h18rBgW c9h18rCqW c9h18rDqW c9h18rEqW  
c9h18rAgX c9h18rBgX c9h18rCqX c9h18rDqX c9h18rEqX  
c9h18rAgY c9h18rBgY c9h18rCqY c9h18rDqY c9h18rEqY  
c9h18rAgZ c9h18rBgZ c9h18rCqZ c9h18rDqZ c9h18rEqZ





```

*****
!***** BASE C0
*****
!*****
! h reactions
!*****
h+h+m=h2+m      1.000E+18      -1.0      0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
h+o2=oh+o      1.900E+14      0.0      16812.0
h+o2+m=h2o+m    8.000E+17      -0.80     0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.40/
h+oh+m=h2o+m    3.000E+22      -2.0      0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/

!*****
! h2 reactions
!*****
h2+o2=oh+oh    1.700E+13      0.0      47780.0 !
(MILLER 77)
o+h2=oh+h      1.30E+04      2.80     5922.0
h2+oh=h2o+h    2.160E+08      1.5      3430.0

!*****
! o reactions
!*****
o+o+m=co2+m     1.140E+17      -1.0      0.0 !
(BAULch 76)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
o+h+m=oh+m     6.200E+16      -0.6      0.0 !
(Dixon-LEWIS 81)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/

!*****
! oh reactions
!*****
h2o+o=oh+oh    1.500E+10      1.14     17260.0 !
(WarnAT2 84)
oh+oh(+)m=h2o2(+)m 7.220E+13      -0.37     0.0
LOW /2.21E+19 -0.76 0.0/
TROE /0.5 1E+08 1E-06/

!*****
! h2o reactions
!*****

```

```

!*****
! ho2 reactions
!*****
ho2+oh=h2o+o2  1.450E+13      0.0      -497.0 !
(RESER 88)
ho2+o=oh+o2    2.440E+13      0.0      -446.0
h+ho2=h2+o2    2.140E+13      0.0      1411.0 !
(94BAU/coB) divided by 2
h+ho2=oh+oh    8.400E+13      0.0      875.0 !
(94BAU/coB) divided by 2
h+ho2=h2o+o    3.010E+13      0.0      1721.0 !
(BAULch 92)
ho2+h2=h2o2+o2 4.200E+14      0.0      11982.0 !
(hiPPLER 90)
DUPLICATE
ho2+h2o=h2o2+o2 1.300E+11      0.0      -1630.0 !
(hiPPLER 90)
DUPLICATE

!*****
! h2o2 reactions
!*****
h2o2+oh=ho2+h2o 5.800E+14      0.0      9557.0
h2o2+h=ho2+h2  1.700E+12      0.0      3750.0
h2o2+h=h2o+oh  1.000E+13      0.0      3590.0
h2o2+o=ho2+oh  2.800E+13      0.0      6400.0

!*****
!***** BASE C1
!*****
!*****
! CO reactions
!*****
co+h2o=co2+h2o 1.150E+05      2.30     17550.0
co+oh=co2+h    9.42E+03      2.25    -2351.0 !Marinov
4.400E+06      1.50    -740.0
co+o+m=co2+m   2.830E+13      0.0      -4540.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
co+o2=co2+o   2.530E+12      0.0      47700.0

!*****
! hco reactions
!*****
hco+m=h+co+m   2.300E+17      -1.0     17090.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
hco+h=co+h2o   1.000E+14      0.0      0.0
hco+o=co+oh    3.000E+13      0.0      0.0
hco+o=co2+h    3.000E+13      0.0      0.0
hco+h=co+h2    7.220E+13      0.0      0.0
hco+o2=co+ho2  7.580E+12      0.0      410.0
hco+ch3=co+ch4 1.200E+14      0.0      0.0
hco+h2o=co2+oh 3.000E+13      0.0      0.0

!*****
! ch3 reactions
!*****
ch3+m=ch2+h+m  1.900E+16      0.00     91600.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch3+m=ch+h2+m  6.900E+14      0.0      82460.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
!ch3+h2o=ch3o+oh 5.000E+12      0.0      0.0 ! Troe
ch3+h2o=ch3o+oh 5.000E+11      0.269    -687.6 !
Jasper et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 279-286 /2
6.100E+09      0.0      -596.0 !
ch3+o=h+ch2o   8.430E+13      0.0      0.0
ch3+o=>h+h2+co  3.370E+13      0.0      0.0
ch3+o2=ch2o+oh 6.620E+11      0.00     14188.0 !
ch3+o2=ch3o+o  6.600E+13      0.0      31398.0
ch3+ch3=c2h5+h 3.010E+13      0.0      13513.0
ch3+ch3(+)m=c2h6(+)m 9.210E+16      -1.174    635.8
LOW /1.135E+36 -5.246 1705/
TROE /0.405 1120.0 69.6 1.00E+15/
ch3+ch3o=ch4+ch2o 2.409E+13      0.0      0.0
ch3+ch2oh=ch4+ch2o 2.410E+12      0.0      0.0
ch3+o2(+)m=ch3o2(+)m 7.800E+08      1.2      0.0
LOW/5.8E+25 -3.30 0.0 /
TROE /0.664 100000.0 10/
ch3+h=ch2+h2   7.000E+13      0.0      15100.0
ch3+oh=ch2+h2o 3.000E+06      2.0      2500.0 ! LECONG

!*****
! ch2 reactions
!*****
ch2+oh=ch+h2o  1.130E+07      2.0      3000.0
ch2+oh=ch2o+h  2.500E+13      0.0      0.0
ch2+o=co+h+h   5.000E+13      0.0      0.0
ch2+o=co+h2    6.000E+13      0.0      0.0
ch2+h=ch+h2    3.500E+14      0.0      0.0
ch2+o2=hco+oh  4.300E+10      0.0      -500.0
ch2+o2=co2+h2  3.450E+11      0.0      1000.0
ch2+o2=co2+h+h 1.600E+12      0.0      1000.0
ch2+o2=co2+h2o 1.870E+10      0.0      -1000.0
ch2+o2=co+oh+h 8.640E+10      0.0      -500.0
ch2+o2=ch2o+o  5.000E+13      0.0      9000.0
ch2+co2=ch2o+co 1.100E+11      0.0      1000.0
ch2+ch2=c2h2+h2 3.200E+13      0.0      0.0
ch2+ch2=c2h2+h+h 4.000E+13      0.0      0.0
ch2+ch3=c2h4+h 4.000E+13      0.0      0.0
ch2+ch2=c2h2+h 4.000E+13      0.0      0.0
ch2+c2h2=h+c3h3 1.200E+13      0.0      6620.0
ch2+c2h4=c3h6  4.300E+12      0.0      10038.0
ch2+c2h6=ch3+c2h5 6.500E+12      0.0      7911.0

!*****
! sch2 reactions
!*****
sch2+m=ch2+m   1.000E+13      0.0      0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/

```

```

hco+hco=ch2o+co 1.200E+13      0.0      0.0
hco+hco=h2+co+co 3.000E+12      0.0      0.0
hco+c2h6=ch2o+c2h5 4.700E+04      2.7      18235.0

!*****
! o2cho, ho2cho and ocho reactions
!*****
o2cho=hco+o2   7.766E+26      -3.96    44230.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
rev / 1.200E+11      0.00    -1100.0 /
ho2cho=ocho+oh 5.010E+14      0.00    40150.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
rev / 2.322E+06      2.15     655.0 /
2.443E+15      -0.50    26500.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
rev / 7.500E+13      0.00    29000.0 /
!hoch2o=ch2o+oh 8.545E+13      -0.10    1.753E+04
! rev / 2.600E+12      0.00    -6.140E+02 /
hoch2o=hcho+h  1.000E+14      0.00    1.490E+04
rev / 5.917E+11      0.64    1.230E+04 /
hocho+m=co+h2o+m 2.300E+13      0.00    5.000E+04
rev / 1.422E+10      0.46    4.684E+04 /
hocho+m=co2+h2+m 1.500E+16      0.00    5.700E+04
rev / 2.399E+14      0.46    6.102E+04 /
4.593E+18      -0.46    1.083E+05
hocho=hco+oh   1.000E+14      0.00    0.000E+00
rev / 5.600E+12      0.00    1.360E+04
8.584E+11      0.04    2.675E+04 /
ocho=ho2=hcho+o2 3.500E+10      0.00    -3.275E+03
rev / 3.699E+12      -0.29    5.269E+04
ocho+h2o2=hcho+ho2 2.400E+12      0.00    1.000E+04
rev / 1.793E+11      0.36    2.479E+04
hocho+oh=h2o+co2+h 2.620E+06      2.06    9.160E+02
rev / 0.000E+00      0.00    0.000E+00
1.850E+07      1.51    -9.620E+02
hocho+oh=h2o+co+oh 0.000E+00      0.00    0.000E+00
rev / 4.240E+06      2.10    4.868E+03
hocho+h=h2+co2+h 0.000E+00      0.00    0.000E+00
rev / 6.030E+13      -0.35    2.988E+03
hocho+h=h2+co+oh 0.000E+00      0.00    0.000E+00
rev / 3.900E-07      5.80    2.200E+03
0.000E+00      0.00    0.000E+00
hocho+ho2=h2o2+co+oh 1.000E+12      0.00    1.192E+04
rev / 0.000E+00      0.00    0.000E+00
hocho+o=co+oh+oh 1.770E+18      -1.90    2.975E+03
rev / 0.000E+00      0.00    0.000E+00

!*****
! ch4 reactions
!*****
!ch4+o2=ch3+ho2 4.000E+13      0.0      56900.0
ch3+ho2=ch4+o2 1.000E+12      0.0      0.0 !
LECONG
ch4(+)m=ch3+h(+)m 2.400E+16      0.0      104913.0
LOW /4.5E+17 0.0 90800/
TROE /0.64 1.0E-15 3195.0 12126.0/
ch4+oh=ch3+h2o 1.600E+06      2.10     2462.0 !
Warnatz 84
ch4+o=ch3+oh   1.620E+06      2.30     7094.0
ch4+h=ch3+h2   2.250E+04      3.0      8756.6
ch4+ch2=ch3+ch3 4.300E+12      0.0      10038.0

```

```

!*****
! ch3 reactions
!*****
ch3+m=ch2+h+m  1.900E+16      0.00     91600.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch3+m=ch+h2+m  6.900E+14      0.0      82460.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
!ch3+h2o=ch3o+oh 5.000E+12      0.0      0.0 ! Troe
ch3+h2o=ch3o+oh 5.000E+11      0.269    -687.6 !
Jasper et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 279-286 /2
6.100E+09      0.0      -596.0 !
ch3+o=h+ch2o   8.430E+13      0.0      0.0
ch3+o=>h+h2+co  3.370E+13      0.0      0.0
ch3+o2=ch2o+oh 6.620E+11      0.00     14188.0 !
ch3+o2=ch3o+o  6.600E+13      0.0      31398.0
ch3+ch3=c2h5+h 3.010E+13      0.0      13513.0
ch3+ch3(+)m=c2h6(+)m 9.210E+16      -1.174    635.8
LOW /1.135E+36 -5.246 1705/
TROE /0.405 1120.0 69.6 1.00E+15/
ch3+ch3o=ch4+ch2o 2.409E+13      0.0      0.0
ch3+ch2oh=ch4+ch2o 2.410E+12      0.0      0.0
ch3+o2(+)m=ch3o2(+)m 7.800E+08      1.2      0.0
LOW/5.8E+25 -3.30 0.0 /
TROE /0.664 100000.0 10/
ch3+h=ch2+h2   7.000E+13      0.0      15100.0
ch3+oh=ch2+h2o 3.000E+06      2.0      2500.0 ! LECONG

!*****
! ch2 reactions
!*****
ch2+oh=ch+h2o  1.130E+07      2.0      3000.0
ch2+oh=ch2o+h  2.500E+13      0.0      0.0
ch2+o=co+h+h   5.000E+13      0.0      0.0
ch2+o=co+h2    6.000E+13      0.0      0.0
ch2+h=ch+h2    3.500E+14      0.0      0.0
ch2+o2=hco+oh  4.300E+10      0.0      -500.0
ch2+o2=co2+h2  3.450E+11      0.0      1000.0
ch2+o2=co2+h+h 1.600E+12      0.0      1000.0
ch2+o2=co2+h2o 1.870E+10      0.0      -1000.0
ch2+o2=co+oh+h 8.640E+10      0.0      -500.0
ch2+o2=ch2o+o  5.000E+13      0.0      9000.0
ch2+co2=ch2o+co 1.100E+11      0.0      1000.0
ch2+ch2=c2h2+h2 3.200E+13      0.0      0.0
ch2+ch2=c2h2+h+h 4.000E+13      0.0      0.0
ch2+ch3=c2h4+h 4.000E+13      0.0      0.0
ch2+ch2=c2h2+h 4.000E+13      0.0      0.0
ch2+c2h2=h+c3h3 1.200E+13      0.0      6620.0
ch2+c2h4=c3h6  4.300E+12      0.0      10038.0
ch2+c2h6=ch3+c2h5 6.500E+12      0.0      7911.0

!*****
! sch2 reactions
!*****
sch2+m=ch2+m   1.000E+13      0.0      0.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/

```



(TULLY 88)  
 c2h4+o=c2h3+hco 1.200E+08 1.44 530.0 !  
 (FonTlJn 87)  
 c2h4+o=c2h2co+h 2.000E+08 1.44 530.0 !  
 (FonTlJn 87)  
 c2h4+h=c2h3+h2 1.000E+14 0.00 15009.0 !  
 (MAh/LcU 88)  
 !c2h4+o2=c2h3+ho2 4.000E+13 0.00 61500.0 !  
 (WALKER 77)  
 c2h4+o2=c2h3+ho2 4.220E+13 0.00 57629.0 !  
 Tsang 1986  
 c2h4+c2h4=c2h5+c2h3 5.000E+14 0.00 64700.0 !  
 (BEhSon 67)  
 c2h4+ch=c2h3+ch4 6.630E+00 3.70 9499.0 !  
 (24/08/2000 Tsang 86 \*0.15-0.57)  
 c2h4+ho2=c2h3+h2o2 4.800E+04 2.50 27622.0 !  
 Scott and Walker 2002

!\*\*\*\*\*  
 ! VINYL c2h3 reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h3+ho2=>ch3+co+oh 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 (TSANG hAmPSON 86)  
 c2h3+oh=c2h2+h2o 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 (TSANG hAmPSON 86)  
 c2h3+h=c2h2+h2 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 (hEINEMANN 88)  
 c2h3+o=c2h3+co 1.500E+13 0.00 0.0 !  
 (hEINEMANN 88)  
 c2h3+o=c2h2co+h 1.500E+13 0.00 0.0 !  
 (hEINEMANN 88)  
 c2h3+ch=c2h2+c2h2 5.000E+13 0.00 0.0 !  
 (MILLER 92)  
 c2h3+ch2=ac3h4+h 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 (MILLER 92)  
 c2h3+ch3=c2h2+ch4 3.910E+11 0.00 0.0 !  
 (TSANG/hAmPSON 86)  
 c2h3+c2h6=c2h4+c2h5 1.500E+13 0.00 10000.0 !  
 (HIDAKA 85)  
 c2h3+c2h=c2h2+c2h2 9.640E+11 0.00 0.0 !  
 (TSANG/hAmPSON 86)  
 c2h3+c2h2=c4h4+h 2.000E+12 0.00 5000.0 !  
 (89 FAHR/STE)  
 c2h3+hco=c2h4+co 9.034E+13 0.00 0.0 !  
 (TSANG hAmPSON 86)  
 c2h3+ch2=c2h4+hco 5.420E+03 2.81 5862.0 !  
 (TSANG hAmPSON 86)  
 c2h3+c2h3=c2h2+c2h4 1.084E+13 0.00 0.0 !  
 (FAHR 298K 90)  
 c2h3+c2h3=c4h6 5.000E+13 0.00 0.0 !  
 (FAHR 298K 90 )  
 c2h3+c2h4=c4h6+h 1.270E+12 0.00 7305.0 !  
 c2h3+ch3=c3h5+h 4.73E+02 3.7 5677.0 ! (i)

!\*\*\*\*\*  
 !c2h2 reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h2+oh(+) =c2h2oh(+) 2.290E+13 0.00 1808.0 !  
 (FULLE: BER.BUNSENGES.P.C. 101, 1433 (1997))

c2h2+o2=hcco+oh 1.210E+13 0.00 74520.0 !  
 (MILLER 92)  
 c2h2+o2=c2h+ho2 1.210E+13 0.00 74520.0 !  
 (TSANG86)  
 c2h2+h2=ch2co+oh 6.090E+09 0.00 7948.0 !  
 (TSANG 86)  
 c2h2+oh=c2h+h2o 3.400E+07 2.00 14000.0 !  
 (MILLER88)  
 c2h2+oh=c2h3+co 4.840E-04 4.00 -2000.0 !  
 (MILLER88)  
 c2h2+oh=c2co+h 2.192E-04 4.50 -1000.0 !  
 (MILLER 88)  
 c2h2+oh=hcco+h 5.059E+05 2.30 13500.0 !  
 (MILLER 88)  
 c2h2+o=c2h2+co 1.980E+04 2.60 656.0 !  
 (87MAh/FONT 0.3)  
 c2h2+o=hcco+h 4.620E+04 2.60 656.0 !  
 (87MAh/FONT 0.7)  
 c2h2+h=c2h+ch4 1.800E+11 0.00 17290.0 !  
 (TSANG/hAmPSON86)  
 c2h2+h(+) =c2h3(+) 2.340E+15 -0.90 3064.0 !  
 LOW / 2.254E+40 -7.269 6577.0 /  
 TROE/ 0.50 675 675/  
 h2o/5.00/ co/2.00/ co2/3.00/ h2/2.00/ ar/0.75/

!\*\*\*\*\*  
 !c2h reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h+h2=c2h2+h 1.506E+13 0.00 3100.0 !  
 (WARNAITZ 84)  
 c2h+oh=hcco+h 2.000E+13 0.00 0.0 !  
 (MILLER 92)  
 c2h+o=c2h+co 1.000E+13 0.00 0.0 !  
 (WARNAITZ 84)  
 c2h+o2=co+hco 2.410E+12 0.00 0.0 !  
 (TSANG 86)

!\*\*\*\*\*  
 !c2h4 reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h4=ch4+co 1.210E+13 0.00 57200.0 !  
 (LIFSHITZ 83)  
 c2h4=ch3co 6.000E+13 0.00 57200.0 !  
 (LIFSHITZ 83<)  
 c2h4=ch3+hco 4.900E+13 0.00 57200.0 !  
 (LIFSHITZ 83>)  
 c2h4+o2=c2h3o+h2 4.000E+13 0.00 61500.0 !  
 (=c2h4+o2)  
 c2h4+h=c2h3+h2o 2.000E+13 0.00 8300.0 !  
 (LIFSHITZ 83)  
 c2h4+h=c2h3+h2o 5.000E+09 0.00 5000.0 !  
 (LIFSHITZ 83)  
 c2h4+h=c2h4+oh 9.510E+10 0.00 5000.0 !  
 (LIFSHITZ 83)  
 c2h4+o=c2h3o+oh 1.910E+12 0.00 5250.0 !  
 (BOGAN 78)  
 c2h4+oh=c2h3o+h2o 4.790E+13 0.00 5955.0 !  
 (90WILK/CERN)

c2h4+ho2=c2h3o+h2o2 4.000E+12 0.00 17000.0 !  
 (ESTD WALKER)  
 c2h4+ch3=ch4+c2h3o 1.070E+12 0.00 11830.0 !  
 (BALDWIN 84)

!\*\*\*\*\*  
 !c2h4o2 reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h4o2h=c2h4o+h 3.160E+11 0.00 19500.0 !  
 (MARINOV94)

!\*\*\*\*\*  
 ! Ethanol reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h5oh(+) =ch3+ch2oh(+) 5.940E+23 -1.68 91163.0 !  
 Marinov 1998  
 LOW / 2.880E+85 -18.90 109914.0 /  
 TROE / 0.5 200. 890. 4600. /  
 h2o/5. / h2/2.0/ co2/3.0/ co/2.0/

c2h5oh(+) =c2h5+oh(+) 1.250E+23 -1.54 96005.0 !  
 Marinov 1998  
 LOW / 3.252E+85 -18.81 114930.0 /  
 TROE / 0.5 300. 900. 5000. /  
 h2o/5. / h2/2.0/ co2/3.0/ co/2.0/

c2h5oh(+) =c2h4+h2o(+) 2.790E+13 0.09 66136.0 !  
 Marinov 1998  
 LOW / 2.570E+83 -18.85 86452.0 /  
 TROE / 0.70 350. 800. 3800. /  
 h2o/5. /

c2h5oh(+) =ch3co+h2(+) 7.240E+11 0.095 91007.0 !  
 Marinov 1998  
 LOW / 4.460E+87 -19.42 115586.0 /  
 TROE / 0.9 900. 1100. 3500. /  
 h2o/5. /

c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2 2.000E+13 0.00 52800.0 !  
 Curran 1998  
 rev / 3.470E+08 0.32 -1.105E+03 /  
 c2h5oh+o2=ch3choh+ho2 1.500E+13 0.00 50150.0 !  
 Curran 1998  
 rev / 1.079E+09 0.63 -5.040E+02 /

c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o 6.200E+03 2.68 -576.0 !  
 Xu Lin pci 2007 31 159-166  
 c2h5oh+oh=ch3choh+h2o 1.306E+05 2.43 -1457.0 !  
 Xu Lin pci 2007 31 159-166  
 c2h5oh+oh=c2h5+h2o 2.810E+02 2.97 -580.0 !  
 Xu Lin pci 2007 31 159-166

c2h5oh+h=pc2h4oh +h2 1.878E+03 3.20 7150.0 !  
 Park,Zhu,Lin, JcP 118, 9990-9996 (2003)  
 c2h5oh+h=ch3choh+h2 1.794E+05 2.53 3420.0 !  
 Park,Zhu,Lin, JcP 118, 9990-9996 (2003)  
 c2h5oh+h=c2h5+h2 5.550E-23 10.60 -4459.0 !  
 Park,Zhu,Lin, JcP 118, 9990-9996 (2003)

c2h5oh+o=pc2h4oh +oh 9.690E+02 3.23 4658.0 !  
 Wu, Lee, Xu, Lin, JPCa 2007  
 c2h5oh+o=ch3choh+oh 1.450E+05 2.41 876.0 !

Wu, Lee, Xu, Lin, JPCa 2007  
 c2h5oh+o=c2h5+oh 1.460E-03 4.73 1727.0 !  
 Wu, Lee, Xu, Lin, JPCa 2007

c2h5oh+ch3=pc2h4oh+ch4 3.300E+02 3.30 12291.0 !  
 Xu, Park, Lin, JcP 120, 6593-6599 (2004)  
 c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4 1.990E+01 3.37 7635.0 !  
 Xu, Park, Lin, JcP 120, 6593-6599 (2004)  
 c2h5oh+ch3=c2h5o+ch4 2.035E+00 3.57 7722.0 !  
 Xu, Park, Lin, JcP 120, 6593-6599 (2004)

c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2 8.200E+03 2.55 10750.0 !  
 Marinov 1998  
 c2h5oh+ho2=pc2h4oh+h2o2 1.230E+04 2.55 15750.0 !  
 Marinov 1998  
 c2h5oh+ho2=c2h5o+h2o2 2.500E+12 0.00 24000.0 !  
 Marinov 1998

!\*\*\*\*\*  
 !c2h5o reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h5o+h=ch3co+h+M 1.160E+35 -5.89 25274.0 !  
 Marinov 1998  
 c2h5o+h=ch3+ch2o+M 1.350E+38 -6.96 23800.0 !  
 Marinov 1998  
 c2h5o+o2=ch3co+ho2 4.000E+10 0.00 1100.0 !  
 hartmann 1990  
 c2h5o+co=c2h5+co2 4.680E+02 3.16 5380.0 !  
 Marinov 1998  
 c2h5o+h=ch3+ch2oh 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 c2h5o+h=c2h4+h2o 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 c2h5o+oh=ch3co+h2o 1.000E+13 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998

!\*\*\*\*\*  
 ! ch3choh reactions  
 !\*\*\*\*\*

ch3choh+o2=ch3co+ho2 1.000E+13 0.00 5564.0 !  
 Natarajan Bhaskaran pisstw 1982 13 834  
 ch3choh+ch3=c3h6+h2o 1.000E+13 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 ch3choh+o=ch3co+oh 1.000E+14 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 ch3choh+h=c2h4+h2o 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 ch3choh+h=ch3+ch2oh 3.000E+13 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 ch3choh+ho2=ch3co+oh+oh 4.000E+13 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 ch3choh+oh=ch3co+h2o 5.000E+12 0.00 0.0 !  
 Marinov 1998  
 ch3choh+M=ch3co+h+M 1.000E+14 0.00 25000.0 !  
 Marinov 1998

!\*\*\*\*\*  
 ! pc2h4oh reactions  
 !\*\*\*\*\*

c2h4+oh=pc2h4oh 1.290E+12 0.00 -817.0 !  
 Atkinson 1986

```

pc2h4oh+o2=c2c2h4ch      1.000E+12  0.00 -1100.0 !
Marinov 1998
o2c2h4oh=ch2o+ch2o+oh    6.000E+10  0.00 24500.0 !
Marinov 1998

!*****
!c2h5o2 reactions
!*****

c2h5o2+ch3=c2h5o+ch3o    8.170E+12  0.00 -906.0
c2h5o2=c2h4+ho2          3.570E+04  2.32 27955.0 !
miller/2
c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2    3.400E+11  0.00 -1300.0
c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+ho2  1.990E+12  0.00 11660.0
c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h  2.230E+12  0.00 17190.0
ch4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h  1.810E+11  0.00 18480.0
ch3oh+c2h5o2=c2h5o+ch2o+c2h5o2h  1.810E+12  0.00 13710.0
c2h6+c2h5o2=c2h5+c2h5o2h  1.320E+13  0.00 20470.0
c2h4o+c2h5o2=c2h3o+c2h5o2h  1.130E+13  0.00 30430.0
c3h6+c2h5o2=ac3h5+c2h5o2h  3.240E+11  0.00 14900.0
c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7  1.700E+13  0.00 20460.0
c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7  2.000E+12  0.00 17000.0
c4h8+c2h5o2=Cc4h7-1+c2h5o2h  1.400E+12  0.00 14900.0
c2h5o2+c2h5o2=c2h5o+c2h5o+o2  1.400E+16 -1.61 1860.0

!*****
!c2h5o2h reactions
!*****

c2h5o2h=c2h5o+oh         4.000E+15  0.00 42900.0
c2h5o2h+o=oh+c2h5o2     2.000E+13  0.00 4750.0
c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o   2.000E+12  0.00 -370.0

c2h5o2h+h=ch3hco+oh+h2  3.200E+13  0.00 7700.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+ch3=ch3hco+oh+ch4  5.700E+11  0.00 8700.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+c2h5=ch3hco+oh+c2h6  3.400E+11  0.00 11400.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+oh=ch3hco+oh+h2o  5.900E+12  0.00 900.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+hco=ch3hco+oh+ch2o  1.800E+12  0.00 16700.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+ch3o=ch3hco+oh+ch3oh  6.300E+11  0.00 5500.0 !
Ranzi 94
c2h5o2h+ho2=ch3hco+oh+h2o2  8.000E+11  0.00 16200.0 !
Ranzi 94

!*****
! ch2hco reactions
!*****

ch2hco+o2=ch2co+ho2     1.580E+10  0.00 0.0 !
(MARINOV94)
ch2hco+o2=ch2co+co+oh   2.510E+10  0.00 0.0 !
(MARINOV94)
ch2hco+o2=oh+chocho     2.510E+11  0.00 14640.0 !
(MARINOV94)
ch2hco+o=ch2o+hco       3.980E+13  0.00 0.0 !
(MARINOV94)
ch2hco+ho2=ch2o+hco+oh  1.000E+13  0.00 0.0 !
(MARINOV94)

```

```

chocho+oh=choco+h2o      1.000E+13  0.00 0.0 !
(MARINOV94)
chocho+o=choco+oh       7.240E+12  0.00 1970.0 !
(MARINOV94)
chocho+h=ch2o+hco       1.000E+12  0.00 0.0 !
(MARINOV94)
chocho+h2o=choco+h2o2   1.700E+12  0.00 10700.0 !
(MARINOV94)
chocho+ch3=choco+ch4    1.740E+12  0.00 8440.0 !
(MARINOV94)
chocho+o2=hco+co+ho2    6.300E+13  0.00 30000.0 !
(MARINOV94)

!*****
! choco reactions
!*****

choco=hco+co            2.000E+07  0.00 0.0 !
(MARINOV94)
!choco+o2=co+co+ho2     3.980E+12  0.00 30000.0 !
(MARINOV95)
choco+o2=co+co+ho2     6.300E+13  0.00 30000.0 !

!*****
!c2h3o reactions
!*****

c2h3o=ch2co+h          1.600E+13  0.00 35000.0 !
(=ch2hco/NIST)
c2h3o=ch3co            8.511E+14  0.00 14000.0 !
(90WILK/CER)

!*****
!c2h2oh reactions
!*****

c2h2oh=ch2co+h         5.000E+15  0.00 28000.0 !
(MILLER82)
c2h2oh+h=ch2co+h2      2.000E+13  0.00 4000.0 !
(MILLER82)
c2h2oh+o=ch2co+oh     2.000E+13  0.00 4000.0 !
(MILLER82)
c2h2oh+ch=ch2co+h2o   1.000E+13  0.00 2000.0 !
(MILLER82)
c2h2oh+o2=hco+co+h2  4.000E+12  0.00 -250.0 !
(GUTMANc2h3+o2)

!*****
!hcco reactions
!*****

hcco+h=ch2co+h         1.000E+13  0.00 0.0 !
(MILLER 88)

!*****
!hcco reactions
!*****

hcco+m=ch+co+m        6.000E+15  0.00 58821.0 !
(FRANK 86)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
hcco+oh=hco+co+h      1.000E+13  0.00 0.0 !

```

```

ch2hco+oh=ch2co+h2o      2.000E+13  0.00 0.0
h+ch2co(+m)=ch2hco(+m)  4.860E+11  0.40 -1755.0 !
LOW / 1.012E+42 -7.63 3854.0 /
TROE/ 0.465 201 1773 5333/
h2o/6.00/ co/1.50/ co2/2.00/ ch4/2.00/ c2h5/3.00/ h2/2.00/ ar/0.75/

ch2hco+h=ch2co+h2       4.00E+13  0.0 0.0 ! Marinov
1996
ch2hco+ch3=>c2h5+co+h   4.90E+14 -0.50 0.0 ! (L)

!*****
! ch2co reactions
!*****

ch2co+m=ch2+co+m       3.600E+15  0.00 59270.0 !
(WARNAT284)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch2co+o2=ch2co+co2     2.000E+13  0.00 61500.0 !
(DAGAUT 90 c2h4/2)
ch2co+ho2->ch2o+co+oh  6.000E+11  0.00 12738.0 !
(FILLING 90)
ch2co+o=ch2+co2        1.760E+12  0.00 1349.0 !
(WASHIDA 83)
ch2co+o=hcco+oh        1.000E+13  0.00 8000.0 !
(MILLER 82)
ch2co+oh=ch2oh+co     6.930E+12  0.00 0.0 !
(BAULCh92 68%)
ch2co+oh=hco+ch2o     2.040E+11  0.00 0.0 !
(BAULCh92 2%)
ch2co+oh=hcco+h2o     1.020E+11  0.00 0.0 !
(BAULCh92 1%)
ch2co+oh=ch3+co2      3.100E+12  0.00 0.0 !
(BAULCh92 27%)
ch2co+h=ch3+co        1.500E+04  2.83 673.0 !
(FIT NIST93)
ch2co+h=hcco+h2       1.800E+14  0.00 8600.0 !
(HIDAKA94)
ch2co+ch3=c2h5+co     6.000E+10  0.00 0.0 !
(HIDAKA94/1.5)
ch2co+ch3=hcco+ch4    7.500E+12  0.00 13000.0 !
(HIDAKA94)
ch2co+ch2=hcco+ch3    1.000E+12  0.00 0.0 !
(HIDAKA94)
ch2co+ch2=c2h4+co     3.600E+13  0.00 11000.0 !
(HIDAKA94)

ch+ch2o=ch2co+h       9.46E+13  0.0 -515.0 ! MILLER
1992

!*****
! chocho reactions
!*****

chocho(+m)=ch2o+co(+m)  4.270E+12  0.00 50600.0 !
marinov 1995
LOW / 8.91E+16 0.00 49200.0 /
! marinov 1995

chocho(+m)=co+co+h2(+m) 1.072E+14 0.00 55100.0 !
(MARINOV94, SAITO:JPC 88, 1182 (1984)
LOW / 2.57E+16 0.00 38400.0 /

```

```

(MILLER 82)
hcco+o=co+co+h         1.930E+14  0.00 590.0 !
(VINCKIER 85)
hcco+h=sch2+co         1.500E+14  0.00 0.0 !
(88FRA/RAH)
hcco+o2=co2+co+h      4.780E+12 -0.42 1150.0 !
(MILLER 92)
hcco+ch2=c2h+ch2o     1.000E+13  0.00 2000.0 !
(MILLER 82)
hcco+ch2=c2h3+co      3.000E+13  0.00 0.0 !
(MILLER 82)
hcco+c2h2=c3h3+co     1.000E+11  0.00 3000.0 !
(MILLER 92)
hcco+ch=c2h2+co       5.000E+13  0.00 0.0 !
(MILLER 92)
hcco+hcco=c2h2+co+co  1.000E+13  0.00 0.0 !
(MILLER 92)

hcco+o=ch+co2         2.95E+13  0.0 1113.0 ! FEETERS
1995

!*****
! ch3hco reactions
!*****

ch3hco=ch3+hco        2.450E+16  0.00 84128.0 !
ch3hco+ho2=ch3co+h2o2  1.700E+12  0.00 10700.0 !
(COLKETT 77)
ch3hco+oh=ch3co+h2o   2.350E+10  0.73 -1113.0 !
(BAULCh92)
ch3hco+o=ch3co+oh     5.850E+12  0.00 1808.0 !
(BAULCh92)
ch3hco+h=ch3co+h2     4.100E+09  1.16 2405.0 !
(BAULCh92)
ch3hco+o2=ch3co+ho2   3.010E+13  0.00 39150.0 !
Baulch 92
ch3hco+ch3=ch3co+ch4  1.700E+12  0.00 8440.0 !
(BEELY/HUNT76)
ch3hco+hcco=ch3co+ch2o  7.800E+13  0.00 8440.0 !
(DAGAUT95)
!ch3hco+o2=ch2hco+ho2  1.000E+13  0.50 46000.0

ch3o2+ch3hco=ch3o2h+ch3co  3.010E+12  0.00 11930.0
rev / 2.519E+13 -0.51 8991.0 /
ch3hco+ch3co3=ch3co+ch3co3h  3.010E+12  0.00 11930.0
rev / 1.955E+12 0.02 26810.0 /
ch3hco+oh=ch3+hocho    3.000E+15 -1.08 0.0
rev / 5.350E+19 -1.68 119800.0 /

!*****
! ch3co reactions
!*****

ch3co+m=ch3+co+m      8.640E+15  0.00 14400.0 !
(WILK89)
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/ h2/2.50/
ar/0.75/
ch3co+o2=ch3co3 1.200E+11 0.00 -1100.0
ch3co3+ho2=ch3co3h+o2 1.750E+10 0.00 -3275.0
ch3co3h=ch3co2+oh 5.010E+14 0.00 40150.0
ch3co2+m=ch3+co2+m 4.400E+15 0.00 10500.0

```





```

ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o      1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+ic3h7=ic3h7o+ic3h7o   1.900E+12    0.00   -1200.0
nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o   1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+ic3h7o=oh              1.900E+12    0.00   -1200.0

!*****
! C3h7O reactions Propanoxy radical
!*****

nc3h7o=ethco+h                 2.510E+14    0.00   23400.0
nc3h7o=c2h5+ch2o              1.000E+15    0.00   21600.0

ic3h7o=acetone+h              2.000E+14    0.00   21500.0
ic3h7o=ch3+ch3co              3.980E+14    0.00   17200.0
ic3h7o+o2=acetone+ho2        9.090E+09    0.00    390.0

!*****
! C3h7o2 reactions
!*****

ic3h7o2+acrol=c2h3co+ic3h7o2h  2.800E+12    0.00   13600.0
ic3h7o2+c2h4=c2h3+ic3h7o2h     1.130E+13    0.00   30430.0
ic3h7o2+ethco=ic3h7o2h+c2h5co  2.000E+11    0.00    9500.0
ic3h7o2+c2h6=ic3h7o2h+c2h5     1.700E+13    0.00   20460.0
ic3h7o2+ch2o=ic3h7o2h+hco      5.600E+12    0.00   13600.0
ic3h7o2+ch3hco=ic3h7o2h+ch3co  2.800E+12    0.00   13600.0
ic3h7o2+ch4=ch3+ic3h7o2h      1.120E+13    0.00   24640.0
ic3h7o2+h2=ic3h7o2h           3.010E+13    0.00   26030.0
ic3h7o2+ch3oh=ch2oh+ic3h7o2h  6.300E+12    0.00   19360.0
ic3h7o2+ho2=ic3h7o2h+o2       2.900E+11    0.00   1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+c2h5o+o2  5.000E+10    0.00    0.0
ic3h7o2+ic3h7o2=ic3h7o+ic3h7o  5.000E+10    0.00    0.0
ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2 5.000E+10    0.00    0.0
!ic3h7o2+ch3co3=ic3h7o+ch3co2+o2 5.000E+10    0.00    0.0
ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2   1.000E+11    0.00    0.0
ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2       1.000E+11    0.00    0.0
ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+c2h5o     1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+ac3h5=ic3h7o+c3h5o    1.900E+12    0.00   -1200.0
ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o       1.900E+12    0.00   -1200.0
!ic3h7o2=c3h6ooh2-1           1.780E+13    0.00   29700.0

nc3h7o2+acrol=c2h3co+nc3h7o2h  2.800E+12    0.00   13600.0
nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h     1.130E+13    0.00   30430.0
nc3h7o2+ethco=nc3h7o2h+c2h5co  2.000E+11    0.00    9500.0
nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5     1.700E+13    0.00   20460.0
nc3h7o2+ch2o=nc3h7o2h+hco      5.600E+12    0.00   13600.0
nc3h7o2+ch3hco=nc3h7o2h+ch3co  2.800E+12    0.00   13600.0
nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h      1.120E+13    0.00   24640.0
nc3h7o2+h2=ic3h7o2h           3.010E+13    0.00   26030.0
nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h  6.300E+12    0.00   19360.0
nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2       2.900E+11    0.00   1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+c2h5o+o2  5.000E+10    0.00    0.0
nc3h7o2+nc3h7o2=nc3h7o+nc3h7o  5.000E+10    0.00    0.0
nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2   1.000E+11    0.00    0.0
nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2       1.000E+11    0.00    0.0
nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+c2h5o     1.900E+12    0.00   -1200.0
nc3h7o2+ac3h5=nc3h7o+c3h5o    1.900E+12    0.00   -1200.0

```

```

nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o      1.900E+12    0.00   -1200.0
!nc3h7o2=c3h6ooh1-3          7.420E+11    0.00   23900.0
!nc3h7o2=c3h6ooh1-2          5.950E+12    0.00   27900.0
!nc3h7o2=c3h6ooh1-3          8.625E+08    1.00   28000.0
!nc3h7o2=c3h6ooh1-2          3.346E+09    1.00   32500.0
nc3h7o2=c3h6ooh1-3           3.750E+10    0.00   24400.0 !
rev / 5.312E+12                -0.56   11180.0 /
nc3h7o2=c3h6ooh1-2           2.000E+11    0.00   26850.0
rev / 1.905E+12                -0.17   17650.0 /
ic3h7o2=c3h6ooh2-1           6.000E+11    0.00   29400.0
rev / 1.700E+12                -0.54   14360.0 /

!*****
! C3h7o2h reactions
!*****

nc3h7o2h=nc3h7o+oh           8.059E+19   -1.50   47000.0
ic3h7o2h=ic3h7o+oh           8.423E+19   -1.44   46080.0

!*****
! c3h6ooh reactions
!*****

c3h6ooh1-2=c3h6o+oh          1.250E+15   -1.19   17580.0
rev / 4.965E+08                1.03   29090.0 /
c3h6ooh1-3=c3h6o1-3+oh      4.31E+15    -1.31   18240.0
rev / 1.192E+18                -1.52   33770.0 /
c3h6ooh2-1=c3h6o+oh         3.460E+16   -1.61   18870.0
rev / 2.787E+17                -1.52   33090.0 /

!c3h6ooh1-2=c3h6+ho2        5.500E+14   -0.85   15260.0
rev / 6.466E+10                0.20   8279.0 /
!c3h6ooh2-1=c3h6+ho2       2.440E+19   -2.14   18230.0
rev / 5.818E+22                -3.23   13960.0 /

c3h6ooh1-2=c3h6+ho2         7.330E+09    0.646   17860.0 !
Chen Bozelli
rev / 2.470E+04                2.132   12160.0 /
c3h6ooh2-1=c3h6+ho2       3.650E+12    0.08   20320.0 !
Chen Bozelli
rev / 7.740E+03                2.285   11080.0 /

c3h6ooh1-3=oh+ch2o+c2h4     1.160E+17   -1.10   32570.0

!*****
! c3h6ooh-o2 reactions
!*****

!c3h6ooh1-2o2=c3h6ooh1-2+o2 3.879E+14    0.29   34150.0
!c3h6ooh1-3o2=c3h6ooh1-3+o2 3.162E+18   -1.32   34400.0
!c3h6ooh2-1o2=c3h6ooh2-1+o2 2.284E+12    0.79   33140.0

!c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2 1.840E+45   -11.10   6538.0
!c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2 4.820E+36   -8.23   5167.0
!c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2 4.820E+36   -8.23   5167.0

c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2 7.540E+12    0.00    0.0
rev / 2.702E+20                -1.53   37610.0 /

```

```

c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2   4.520E+12    0.00    0.0
rev / 1.213E+19                -1.32   35910.0 /
c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2   4.520E+12    0.00    0.0
rev / 7.998E+18                -1.34   35930.0 /

!c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh      2.965E+12    0.00   26700.0
!c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh     2.470E+11    0.00   20900.0
!c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh     1.485E+12    0.00   24900.0

c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh      2.000E+11    0.00   26400.0
rev / 1.418E+07                0.62   48360.0 /
c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh     2.500E+10    0.00   21400.0
rev / 4.447E+05                1.00   51030.0 /
c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh     1.000E+11    0.00   23850.0
rev / 2.142E+05                1.12   49190.0 /

!*****
! C3ket reactions
!*****

!c3ket12=ch3hco+hco+oh       1.000E+16    0.00   43000.0
!c3ket13=ch2o+ch2hco+oh     1.000E+16    0.00   43000.0
!c3ket21=ch2o+ch3co+oh      1.000E+16    0.00   43000.0

c3ket12=ch3hco+hco+oh       1.050E+16    0.00   41600.0
c3ket13=ch2o+ch2hco+oh     1.500E+16    0.00   42000.0
c3ket21=ch2o+ch3co+oh      1.500E+16    0.00   42000.0

!*****
! c3h6o#x REACTIONS
!*****

! O-ring decomposition
!*****

c3h6o+h=h2+ch2coch3         2.700E+07    2.00   5000.0 !
DOR 4947
c3h6o+oh=h2o+ch2coch3       7.800E+06    2.00   -765.0 !
DOR 4948
c3h6o+ho2=h2o2+ch2coch3     1.200E+12    0.00   15500.0 !
DOR 4949
c3h6o+ch3=ch4+ch2coch3      6.000E+11    0.00   9600.0 !
DOR 4950
c3h6o+ch3o2=ch3o2h+ch2coch3 6.000E+11    0.00   9600.0 !
DOR 4951
c3h6o+c2h5=c2h6+ch2coch3    6.000E+11    0.00   11000.0 !
DOR 4952
c3h6o+o=oh+ch2coch3        7.800E+13    0.00   5200.0 !
DOR 5103

!c3h6o1-3+h=>h2+hco+c2h4     2.700E+07    2.00   5000.0
! DOR 4995
!c3h6o1-3+o=>h2o+hco+c2h4    7.800E+06    2.00   -765.0
! DOR 4996
!c3h6o1-3+ho2=>h2o2+hco+c2h4 1.200E+12    0.00   15500.0
! DOR 4997
!c3h6o1-3+ch3=>ch4+hco+c2h4 6.000E+11    0.00   9600.0
! DOR 4998
!c3h6o1-3+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2h4 4.500E+12    0.00   17500.0

```

```

! DOR 4999
!c3h6o1-3+c2h5=>c2h6+hco+c2h4 6.000E+11    0.00   11000.0
! DOR 5000
!c3h6o1-3+o=>oh+hco+c2h4     7.800E+13    0.00   5200.0
! DOR 5104

c3h6o=c2h5+hco              2.450E+13    0.00   58500.0 !
Lifshitz, A.; Tamburu, C 1994
c3h6o=ethco                 1.820E+14    0.00   58500.0 !
Lifshitz, A.; Tamburu, C 1994
c3h6o=ch3+ch3co             4.540E+13    0.00   59900.0 !
Lifshitz, A.; Tamburu, C 1994
c3h6o=ch3+ch2hco            2.450E+13    0.00   58820.0 !
Lifshitz, A.; Tamburu, C 1994
c3h6o=ch3+c2h3o             8.000E+15    0.00   92010.0 !
Lifshitz, A.; Tamburu, C 1994

c3h6o1-3+h=ch2ch2hco+h2     2.700E+07    2.00   5000.0 !
c3h6o1-3+oh=ch2ch2hco+h2o   7.800E+06    2.00   -765.0 !
c3h6o1-3+ho2=ch2ch2hco+h2o2 1.200E+12    0.00   15500.0 !
c3h6o1-3+ch3=ch2ch2hco+ch4 6.000E+11    0.00   9600.0 !
DOR 4999
c3h6o1-3+c3ho2=ch3o2h+ch2ch2hco 4.500E+12    0.00   17500.0 !
c3h6o1-3+c2h5=c2h6+ch2ch2hco 6.000E+11    0.00   11000.0 !
DOR 5000
c3h6o1-3+o=oh+ch2ch2hco     7.800E+13    0.00   5200.0 !
DOR 5104
c3h6o1-3=ethco              1.820E+14    0.00   58500.0 !
idem c3h6o

!*****
!c3h6 reactions Propene
!*****

ac3h5+h(+m)=c3h6(+m)        3.700E+14    0.00    0.0 !
TS5 600cm-1 ! k_opt=1.85*ko WANG
LOW / 1.33E+60                -12.00   5967.8 /
TROT/ 0.020 1096.6 1096.6 6859.5 /
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/

c3h6=sc3h5+h                7.590E+14    0.00   101300.0 !
(86Na/NIE)
c3h6=c3h5+h                 1.450E+15    0.00   98060.0 !
(NARONNIK 86)
c3h6=c2h3+ch3              1.100E+21    -1.20   97720.0 !
(TSANG91)
c3h6=ch4+c2h2              3.500E+12    0.00   70000.0 !
(92HD/NAK)
c3h6+o2=ac3h5+ho2          1.950E+12    0.00   39000.0 !
(91STO/WAL)
c3h6+o2=sc3h5+ho2          1.400E+13    0.00   60200.0 !
(WALKER77)
c3h6+o2=tc3h5+ho2         7.000E+12    0.00   60200.0 !
(WALKER77)
c3h6+ho2=c3h6o+oh          1.020E+12    0.00   14964.0 !
(WALKERSIC 90)
c3h6+ho2=ac3h5+h2o2        1.500E+11    0.00   14190.0 !
(BALDWIN 84, EST)
c3h6+ho2=sc3h5+h2o2        7.500E+09    0.00   12570.0 !
(WALKER 77, EST<)
c3h6+ho2=tc3h5+h2o2        3.000E+09    0.00   9930.0 !
(WALKER 77, EST<)
c3h6+oh=ac3h5+h2o          7.698E+05    2.214   622.0 !

```

(DAGAUT92)  
c3h6+oh=sc3h5+h2o 1.013E+13 0.00 5960.0 !  
(DAGAUT92)  
c3h6+oh=tc3h5+h2o 1.110E+06 2.00 1450.0 !  
(TSANG91)  
c3h6+o=c2h5+hco 4.689E+07 1.57 -628.0 !  
(mAh/FON88 30/100)  
c3h6+o=ch3+ch2hco 3.900E+07 1.57 -628.0 !  
(mAh/FON88 25/100)  
c3h6+o=c2h4+ch2o 7.020E+07 1.57 -628.0 !  
(mAh/FON88 45/100)  
c3h6+o=ac3h5+oh 1.750E+11 0.70 5884.0 !  
(TSANG91)  
c3h6+o=sc3h5+oh 1.200E+11 0.70 8960.0 !  
(TSANG91)  
c3h6+o=tc3h5+oh 6.000E+10 0.70 7633.0 !  
(TSANG91)  
c3h6+h=c2h4+ch3 7.230E+12 0.00 1302.0 !  
(TSANG91)  
c3h6+h=ac3h5+h2 6.457E+12 0.00 4445.0 !  
Kornov  
c3h6+h=sc3h5+h2 3.456E+14 0.00 17422.0 !  
(TSANG91 030796)  
c3h6+h=tc3h5+h2 1.670E+14 0.00 14818.0 !  
(TSANG91 030796)  
c3h6+ch3=ac3h5+ch4 1.600E+11 0.00 8800.0 !  
(ALLARA 80)  
c3h6+ch3=sc3h5+ch4 3.300E+11 0.00 10110.0 !  
(DAGAUT 88/2)  
c3h6+ch3=tc3h5+ch4 5.000E+10 0.00 8030.0 !  
(DAGAUT 261090)  
c3h6+c2h5=ac3h5+c2h6 1.000E+11 0.00 9800.0 !  
(EDELSON 80)  
c3h6+c2h3=c4h6+ch3 7.200E+11 0.00 5008.0 !  
(91TSA)  
  
c3h6+c2h3=ac3h5+c2h4 2.210E+00 3.50 4682.0 !  
c3h6+c2h3=tc3h5+c2h4 2.210E+00 3.50 4682.0 !  
c3h6+c2h3=sc3h5+c2h4 2.210E+00 3.50 4682.0 !  
  
c3h6+hco=ac3h5+ch2o 1.08E+07 1.90 17010.0 !  
TSANG 1991  
  
c3h6+o=ch2co+ch3+h 2.500E+07 1.76 7.600E+01  
rev / 1.000E+00 0.00 0.000E+00 /  
c3h6+o=ch3cho+ch+h 2.500E+07 1.76 7.600E+01  
rev / 0.000E+00 0.00 0.000E+00 /  
c3h6+ch3o2=ac3h5+ch3o2h 3.240E+11 0.00 1.490E+04  
rev / 2.000E+10 0.00 1.500E+04 /  
  
! \*\*\*\*\*  
! c3h6oh reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
c3h6+oh=c3h6oh 9.930E+11 0.00 -960.0 !  
Curran  
c3h6oh+o2=o2c3h6oh 1.200E+11 0.00 -1100.0 !  
Curran  
! \*\*\*\*\*  
! o2c3h6oh reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
o2c3h6oh=ch3hco+ch2o+oh 1.250E+10 0.00 18900.0 !

Curran  
! \*\*\*\*\*  
! ac3h5 reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
ac3h5+ho2=c3h5o+oh 7.000E12 0.00 -1000.0 !  
Curran  
ac3h5+ch3o2=c3h5o+ch3o 7.000E12 0.00 -1000.0 !  
Curran  
ac3h5+h=ac3h4+h2 rev / 1.994E+15 -0.74 17020.0 /  
(91TSA) 6.030E+12 0.00 0.0 !  
ac3h5+ch3=ac3h4+ch4 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 88)  
ac3h5+ch2=c4h6+h 3.000E+13 0.00 0.0 !  
(91TSA)  
ac3h5+c2h5=ac3h4+c2h6 4.000E+11 0.00 0.0 !  
(SCHARFE 85)  
ac3h5+c2h3=ac3h4+c2h4 1.000E+12 0.00 0.0 !  
(SCHARFE 85)  
  
ac3h5+o=acrol+h 6.030E+13 0.00 0.0 !  
Tsang 1991 J. Phys. Chem. Ref. Data vol. 20 pp. 221-273  
ac3h5+hco=c3h6+co 6.030E+13 0.00 0.0 !  
Tsang 1991 J. Phys. Chem. Ref. Data vol. 20 pp. 221-273  
  
ac3h5+o2=c2h2+ch2o+oh 9.710E+20 -2.70 24980.0 !  
Lea Bozzelli 2005  
ac3h5+o2=acrol+oh 2.470E+13 -0.45 23017.0 !  
Bozzelli and Dean 1993 10 bar  
ac3h5+o2=ac3h4+ho2 2.180E+21 -2.85 30755.0 !  
Bozzelli and Dean 1993 10 bar  
ac3h5+c2h2=ch2hco+ch2o 7.140E+15 -1.21 21046.0 !  
Bozzelli and Dean 1993 10 bar  
  
! \*\*\*\*\*  
! sc3h5 reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
sc3h5=pc3h4+h 5.620E+12 0.00 43500.0 !  
(86Nar/NIE2/4)  
sc3h5+o2=ch3hco+hco 4.335E+12 0.00 0.0 !  
(SLADGLE 88)  
sc3h5+ho2=>ch2co+ch3+oh 4.500E+12 0.00 0.0 !  
(=ac3h4/WALKER 90)  
sc3h5+h=ac3h4+h2 3.333E+12 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
! sc3h5+h=pc3h4+h2 3.333E+12 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
sc3h5+h=pc3h4+h2 4.000E+13 0.00 0.0 !  
  
sc3h5+o=>ch2co+ch3 1.807E+14 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
sc3h5+ch3=ac3h4+ch4 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 88)  
sc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
sc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
  
! \*\*\*\*\*  
! tc3h5 reactions  
! \*\*\*\*\*

! \*\*\*\*\*  
  
tc3h5=ac3h5 2.500E+12 0.00 47000.0 !  
(86OND/21E/8)  
tc3h5+o2=ch3co+ch2o 5.010E+12 0.00 19000.0 !  
(=ac3h5+o2/89WAL)  
tc3h5+o=>ch2co+ch3 1.807E+14 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 92)  
tc3h5+h=pc3h4+h2 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(ESTIMEE)  
tc3h5+ch3=ac3h4+ch4 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
tc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
tc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(DAGAUT 90)  
  
! \*\*\*\*\*  
! ac3h4 reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
ac3h4+m=c3h3+h+m 2.000E+18 0.00 80000.0 !  
(HIDAKA 89)  
h2o/16.25/co/1.875/co2/3.75/ch4/16.25/c2h6/16.25/  
  
ac3h4=pc3h4 3.100E+65 -15.1 93814.0 !  
(KAKUMOTO,10BAR\*2)  
DUPLICATE  
ac3h4=pc3h4 1.202E+15 0.00 92400.0 !  
(DAGAUT92)  
DUPLICATE  
  
ac3h4+o2=c3h3+ho2 4.000E+13 0.00 61500.0 !  
(DAGAUT89)  
! ac3h4+ho2=>c3h4o2h 1.500E+11 0.00 8000.0 !  
(=c2h4+ho2\*bak)  
ac3h4+ho2=>c3h4o2h 3.000E+11 0.00 8000.0 !  
ac3h4+ho2=c3h3+h2o2 1.800E+13 0.00 19000.0 !  
(ESTIMEE)  
ac3h4+ho2=>ch2co+ch2+oh 5.000E+11 0.00 19000.0 !  
(90DAG/CAT)  
ac3h4+ho2=>acrol+oh 5.000E+11 0.00 19000.0 !  
(90DAG/CAT)  
ac3h4+ho2=>c2h2+ch2o+oh 5.000E+11 0.00 19000.0 !  
(90DAG/CAT)  
! ac3h4+oh=c3h3+h2o 2.150E+12 0.00 -200.0 !  
(88LIU/MUL\*RTI\*6.7-2.8)  
ac3h4+oh=c3h3+h2o 3.620E+12 0.00 4170.0 !  
ac3h4+oh=ch2co+ch3 1.000E+12 0.00 -393.0 !  
(90DAG/CAT/3)  
ac3h4+oh=hco+c2h4 1.250E+11 0.00 -393.0 !  
(90DAG/CAT/2)  
ac3h4+oh=c2h5+co 1.875E+11 0.00 -393.0 !  
(90DAG/CAT)  
ac3h4+oh=acrol+h 3.750E+11 0.00 -393.0 !  
(90DAG/CAT\*bak)  
ac3h4+o=c2h4+co 1.125E-02 4.613 -4243.0 !  
(DAGAUT90\*1.5)  
ac3h4+o=c2h3+hco 0.500E-03 4.613 -4243.0 !  
(DAGAUT90)  
ac3h4+o=ch2co+ch2 1.000E-03 4.613 -4243.0 !  
(DAGAUT90)  
ac3h4+o=c2h2+ch2o 2.500E-03 4.613 -4243.0 !  
(DAGAUT90)

ac3h4+h=ac3h5 1.200E+12 0.00 2700.0 !  
(WAGNER 72/3)  
ac3h4+h=sc3h5 8.000E+11 0.00 2000.0 !  
(ESTIMEE)  
ac3h4+h=tc3h5 8.500E+12 0.00 2000.0 !  
(WAGNER 72)  
ac3h4+h=c3h3+h2 1.000E+14 0.00 15009.0 !  
(ESTIMEE)  
ac3h4+ch3=c3h3+ch4 1.333E+12 0.00 7700.0 !  
(MU 87/1.5)  
ac3h4+ac3h5=c3h3+c3h6 9.000E+11 0.00 7700.0 !  
(EST/ac3h4+ch3/2)  
  
! \*\*\*\*\*  
! c3h4o2h reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
c3h4o2h=>ac3h4+ho2 3.160E+11 0.00 19500.0 !  
(=c2h4o2h/2)  
c3h4o2h=>c3h4o+oh 3.160E+11 0.00 19500.0 !  
(=c2h4o2h/2)  
  
! \*\*\*\*\*  
! c3h4o reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
c3h4o=>acrol 2.450E+14 0.00 58485.0 !  
(77FLO/METOXIRAN)  
c3h4o+o2=>c3h3o+ho2 4.000E+13 0.00 61500.0 !  
(=OXIRAN)  
c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh 1.000E+12 0.00 14340.0 !  
(=c4h8+ho2)  
c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2 4.000E+12 0.00 17000.0 !  
(=OXIRAN)  
c3h4o+oh=>c3h3o+h2o 4.790E+13 0.00 5955.0 !  
(=OXIRAN)  
c3h4o+h=>c3h3o+h2 2.000E+13 0.00 8300.0 !  
(=OXIRAN)  
  
! \*\*\*\*\*  
! c3h3o reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
c3h3o=>c2h3co 8.510E+14 0.00 14000.0 !  
(=c2h3co)  
c3h3o+o2=>hcco+hco+oh 5.010E+12 0.00 19192.0 !  
(=ac3h5+o2)  
  
! \*\*\*\*\*  
! pc3h4 reactions  
! \*\*\*\*\*  
  
! pc3h4+m=c3h3+h+m 4.700E+18 0.00 80000.0 !  
(89HID/NAK2)  
pc3h4+m=c3h3+h+m 3.390E+22 -2.00 92370.0 !  
h2o/16.25/co/1.875/co2/3.75/ch4/16.25/c2h6/16.25/h2/2.50/  
pc3h4=c2h+ch3 4.200E+16 0.00 100000.0 !  
(WU/KEARN7)  
pc3h4+o2=c3h3+ho2 2.500E+12 0.00 51000.0 !  
(DAGAUT89)  
pc3h4+o2=>hcco+oh+ch2 1.000E+07 1.50 30100.0 !  
(DAGAUT 89)  
pc3h4+ho2=>c2h4+co+oh 6.090E+09 0.00 7948.0 !  
(09/05/94=c2h2)

```

pc3h4+ho2=ch3co+ch2o      3.000E+12  0.00  16000.0 !
(ESTImEE)
pc3h4+ho2=ch3hco+hco      4.500E+12  0.00  16000.0 !
(ESTImEE)
pc3h4+ho2=c3h3+h2o2      5.000E+11  0.00  19000.0 !
(ESTImEE)
pc3h4+ch=c3h3+h2o        6.500E+02  3.00   200.0 !
(DAGAUT 90/2)
pc3h4+oh=c2co+ch3        2.000E-04  4.50 -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+oh=hco+c2h4        1.000E-04  4.50 -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+oh=c2o+c2h3        1.000E-04  4.50 -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+oh=acrol+h         1.000E-04  4.50 -1000.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=c2co+ch2        6.400E+12  0.00  2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=c2h3+hco         3.200E+12  0.00  2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=hcco+ch3         9.180E+12  0.00  2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=c2o+c2h2        3.200E+11  0.00  2100.0 !
(DAGAUT90)
pc3h4+o=>hcco+ch2+h     3.200E+11  0.00  2010.0 !
(KANOFISKY 74/10)
pc3h4+h=tc3h5            1.300E+13  0.00  1999.0 !
(72MAG/ZELI2)
pc3h4+h=c3h3+h2         2.000E+14  0.00  15000.0 !
(KIEFFER97*RTI*0.1-1.6)
pc3h4+ch3=c3h3+ch4       4.000E+11  0.00  7700.0 !
(WU 87/5)
pc3h4+c2h3=c3h3+c2h4     1.000E+11  0.00  7700.0 !
(DAGAUT 89/10)
pc3h4+c2h=c3h3+c2h2     4.200E+16  0.00  100000.0 !
(WU/KERN87)

!*****
! c3h4oh reactions
!*****

pc3h4+oh(+m)=>c3h4oh(+m)  2.290E+13  0.00  1808.0 !
idem c2h2/FULLE: BER.BUNSENGES.P.C. 101, 1433 (1997)
LOW / 7.444E+26 -3.10  1808.0 /
TROP/ 0.17 180.0 50000.0 12772.0 /

c3h4oh=>ch2co+ch3        3.000E+15  0.00  28000.0 !
(=c2h2oh+m)
c3h4oh=>hco+c2h4         5.000E+14  0.00  28000.0 !
(=c2h2oh+m)
c3h4oh=>ch2o+c2h3        1.000E+15  0.00  28000.0 !
(=c2h2oh+m)
c3h4oh=>acrol+h          5.000E+14  0.00  28000.0 !
(=c2h2oh+m)

!*****
! c3h3 reactions
!*****

c3h3+o2=ch2co+hco        3.010E+10  0.00  2870.0 !
(GUTMAN 86)
c3h3+ho2=c3h2+h2o2       2.000E+12  0.00   0.0 !
(ESTImEE)
c3h3+oh=c3h2+h2o         5.000E+12  0.00   0.0 !

```

```

(DAGAUT 90)
c3h3+oh=hcco+ch3         5.000E+12  0.00   0.0 !
(DAGAUT 90)
c3h3+o=>c2h2+hco         1.385E+14  0.00   0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+o=c2h3+co           4.615E+13  0.00   0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+o=c2h+ch2o          4.615E+13  0.00   0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+o=>c2h2+co+h        4.615E+13  0.00   0.0 !
(SLAGLE 90 23SIC)
c3h3+h=c3h2+h2           5.000E+13  0.00  3000.0 !
(MILLER 92)
c3h3+ch=c3h3+h           7.000E+13  0.00   0.0 !
(MILLER 92)
c3h3+ch=nc4h3+h          7.000E+13  0.00   0.0 !
(MILLER 92)
c3h3+ch2=c4h4+h          4.000E+13  0.00   0.0 !
(MILLER 92)
c3h3+ch3=c4h6            3.330E+12  0.00   0.0 !
(67WU/KERN/1.5)

c3h3+c2h3=c5h5+h        9.63E+40 -7.8  28820.0 ! MarinoV
1996

!*****
! c3h2 reactions
!*****

ch+c2h2=c3h2+h           1.000E+14  0.00   0.0 !
(MILLER 89)
c3h2+o2=hcco+hco         3.000E+10  0.00  2870.0 !
(=c3h3 )
c3h2+oh=c2h2+hco         5.000E+13  0.00   0.0 !
(MILLER 92)
c3h2+ch2=ic4h3+h        3.000E+13  0.00   0.0 !
(MILLER 92)

!*****
! c3h5o reactions
!*****

!c3h5o=acrol+h           1.000E+14  0.00  19000.0 !
(89WIL/CER )

c3h5o=acrol+h            1.000E+14  0.00  29100.0
rev / 7.714E+11 0.48 17750.0 /
c3h5o=c2h3+ch2o          2.028E+12 0.09 23560.0 ! Curran
rev / 1.500E+11 0.00 10600.0 /
c3h5o+o2=acrol+h2o       1.000E+12 0.00 6000.0
rev / 1.288E+11 0.00 32000.0 /

!*****
! propanal REACTIONS
!*****

ethco+h=h2+c2h5co        4.000E+13  0.00  4200.0 !
ALD 5327
ethco+oh=h2o+c2h5co      4.200E+12  0.00  500.0 !
ALD 5328

```

```

ethco+ho2=h2o2+c2h5co    1.000E+12  0.00  10000.0 !
ALD 5329
ethco+ch3=ch4+c2h5co     2.000E-06  5.60  2500.0 !
ALD 5330
ethco+c2h5=c2h6+c2h5co   1.300E+12  0.00  8500.0 !
ALD 5331
ethco+o2=c2h5co+ho2     1.005E+13  0.00  40700.0 !
Curran

c2h5co+M=co+c2h5+M       8.640E+15  0.00  14400.0 !

!*****
! acrolein REACTIONS
!*****

acrol+h=h2+c2h3co        4.000E+13  0.00  4200.0 !
ALD 5332
acrol+oh=h2o+c2h3co      4.200E+12  0.00  500.0 !
ALD 5333
acrol+ho2=h2o2+c2h3co    1.000E+12  0.00  10000.0 !
ALD 5334
acrol+ch3=ch4+c2h3co     2.000E-06  5.60  2500.0 !
ALD 5335
acrol+c2h5=c2h6+c2h3co   1.300E+12  0.00  8500.0 !
ALD 5336

acrol=c2h3+hco           2.450E+16  0.00  84128.0 !
acrol+o=c2h3co+oh        5.010E+12  0.00  1790.0 !
acrol+c2h3=c2h4+c2h3co   1.740E+12  0.00  8440.0 !
acrol+ac3h5=c3h6+c2h3co  1.000E+12  0.00  8000.0 !

c2h3co+m=>c2h3+co+m      8.600E+15  0.00  23000.0
h2o/16.25/ co/1.875/ co2/3.75/ ch4/16.25/ c2h6/16.25/
!c2h3co+ho2=c2h3+co2+oh  2.000E+13  0.00   0.0

!*****
! acetone REACTIONS
!*****

acetone+h2+c2coch3       2.700E+07  2.00  5000.0 !
FCO 5396
acetone+oh=h2o+c2coch3   7.800E+06  2.00 -765.0 !
FCO 5397
acetone+ho2=h2o2+c2coch3 1.200E+12  0.00  15500.0 !
FCO 5398
acetone+ch3=ch4+c2coch3  6.000E+11  0.00  9600.0 !
FCO 5399
acetone+ch3o2=ch3o2h+c2coch3 6.000E+11  0.00  9600.0 !
FCO 5400
acetone+c2h5=c2h6+c2coch3 6.000E+11  0.00  11000.0 !
FCO 5401

!*****
! ch2coch3 REACTIONS
!*****

ch2coch3=ch2co+ch3       1.000E+15  0.00  31000.0 !

```

```

Curran
ch3coch2o2=ch2coch3+o2   9.300E+13 -1.11 27450.0 !
Curran
acetone+ch3coch2o2=ch2coch3+ch3coch2o2h rev / 1.200E+11 0.00 -1100.0 /
Curran 1.000E+11 0.00 5000.0 !
ch2o+ch3coch2o2=hco+ch3coch2o2h rev / 1.995E+10 0.00 10000.0 /
Curran 1.288E+11 0.00 9000.0 !
ho2+ch3coch2o2=ch3coch2o2h+o2 rev / 2.512E+10 0.00 10100.0 /
Curran 1.000E+12 0.00 0.0 !
ch3coch2o2h=ch3coch2o+oh rev / 0.000E+00 0.00 0.0 /
Curran 1.000E+16 0.00 43000.0 !
ch3coch2o=ch3co+ch2o rev / 2.038E+09 1.55 -4375.0 /
Curran 8.711E+16 -1.18 13760.0 !
rev / 1.000E+11 0.00 11900.0 /

!*****
! ch2ch2co REACTIONS
!*****

c2h4+hco=ch2ch2co        2.110E+11  0.00  7350.0 !
ch2ch2hco+o2=ho2c2h4hco  9.000E+18 -2.50 0.0 !
o2c2h4hco+ho2=>ho2c2h4hco+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !
Atkinson et al., 2001
o2c2h4hco=ho2c2h4co      5.340E+05  1.89 20273.5 !
ho2c2h4co=co+c2h4o2h    2.000E+13  0.00 28700.0 !
Curran c2h5co=c2h5+co
ho2c2h4hco=>oc2h4hco+oh 1.500E+16 0.00
42500.0 ! 17 anc7, primary s
ch2o+ch2hco=oc2h4hco    1.500E+11  0.00
11900.0 ! 18 anc7, alk to te

!*****
! ch3cocho REACTIONS
!*****

ch3cocho+oh=ch3coco+h2o  2.300E+10  0.73 -1100.0 !
idem ch3hco+oh
ch3cocho+h=ch3coco+h2    4.100E+09  1.16 2405.0 !
idem ch3hco+h
ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2 3.000E+12  0.0 12000.0 !
idem ch3hco+ho2

ch3coco=ch3co+co         1.400E+14  0.00  6692.0 !
ch3coco+o2=co2+co2+ch3  3.000E+10  0.00  2870.0 !
ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co 2.000E+13  0.00 0.0

ch2co+hco=ch2cocho       2.000E+11  0.00  7800.0 !
addition de c=O sur c de c=c
!
analogy with c3h6+ch3co=c3h6coch3-2
!
Curran, H. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K.
!
Combustion and Flame 129:253-280 (2002).

```

```
#####
! hcoch2hco REACTIONS
#####
hcoch2hco+h=hcoch2co+h2o      4.600E+10  0.73 -1100.0 !
idem ch3hco+oh *2
hcoch2hco+h=hcoch2co+h2      8.200E+09  1.16 2405.0 !
idem ch3hco+h *2
hcoch2hco+h2=hcoch2co+h2o2    6.000E+12  0.0 12000.0 !
idem ch3hco+h2o *2
hcoch2hco+h3=hcoch2co+ch4    1.520E+01  3.4 3740.0 !
idem ch3hco+h3 *2
hcoch2hco+o2=hcoch2co+h2o    6.000E+13  0.0 39200.0 !
idem ch3hco+o2 *2
hcoch2co=ch2hco+co           1.834E+15 -0.73 12910.0 !
idem c2h5co= Curran
```

```
#####
! n-BUTANE
#####
SOUS-mECANISM E C4
```

```
#####
! n-BUTANE
#####
c4h10=c2h5+c2h5              2.000E+16  0.00 81300.0 !
Ristori
c4h10=ch3+nc3h7              1.000E+17  0.00 85400.0 !
Ristori
c4h10=pc4h9+h                 1.580E+16  0.00 98000.0 !
Ristori
c4h10=sc4h9+h                 1.000E+16  0.00 95000.0 !
Ristori
c4h10+o2=pc4h9+h2o           2.512E+13  0.00 49000.0 !
WESTB.86
c4h10+h=pc4h9+h2             5.630E+07  2.00 7700.0 !
FITZ 91
c4h10+o=pc4h9+oh             4.890E+06  2.40 5505.0 !
COHEN.86
c4h10+oh=pc4h9+h2o          4.140E+07  1.73 753.0 !
TULLY 86
c4h10+h2=pc4h9+h2o2         1.700E+13  0.00 20460.0 !
FITZ 88
c4h10+ch3=pc4h9+ch4         2.189E+11  0.00 11400.0 !
FITZ 88
c4h10+c2h3=pc4h9+c2h4       1.000E+12  0.00 18000.0 !
WESTB.86
c4h10+c2h5=pc4h9+c2h6       1.000E+11  0.00 13400.0 !
WESTB.86
```

```
pc4h9=c4h8+h                 1.260E+13  0.00 38600.0 !
(FITZ 86)
sc4h9=t2c4h8+h              4.570E+12  0.00 34000.0 !
(85TSA)
sc4h9=c2c4h8+h              4.170E+12  0.00 34780.0 !
(85TSA)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!pc4h9+o2=c4h8+h2o           3.800E+10  0.00 -2000.0 !
(FITZ 88)
pc4h9+o2=c4h8+h2o           1.900E+12  0.00 5000.0 !
sc4h9+o2=c4h8+h2o           7.590E+09  0.00 -2000.0 !
(FITZ 88)
sc4h9+o2=t2c4h8+h2o         9.000E+09  0.00 -2000.0 !
(FITZ 88)
sc4h9+o2=c2c4h8+h2o         9.000E+09  0.00 -2000.0 !
(FITZ 88)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
pc4h9=sc4h9                   1.390E+09  0.98 33760.0 !
(WB98)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) h abstraction
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
pc4h9+h2o=c4h8+h2o2         2.410E+13  0.00 0.0 !
(=nc3h7/TSA88)
pc4h9+h2o=c4h8+h2o          2.400E+13  0.00 0.0 !
(=nc3h7/TSA88)
pc4h9+h=c4h8+h2             1.250E+13  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
pc4h9+ch3=c4h8+ch4          2.000E+12  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
pc4h9+c2h5=c4h8+c2h6        1.600E+12  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
pc4h9+ac3h5=c4h8+c3h6       1.000E+12  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
sc4h9+h2o=c4h8+h2o2         2.400E+13  0.00 0.0 !
(=ic3h7/TSA88)
sc4h9+h2o=t2c4h8+h2o2      2.400E+13  0.00 0.0 !
(=ic3h7/TSA88)
sc4h9+h2o=c2c4h8+h2o2      2.400E+13  0.00 0.0 !
(=ic3h7/TSA88)
sc4h9+oh=c4h8+h2o          2.400E+13  0.00 0.0 !
(=ic3h7/TSA88)
sc4h9+oh=t2c4h8+h2o        2.400E+13  0.00 0.0 !
(=nc3h7/TSA88)
sc4h9+oh=c2c4h8+h2o        2.400E+13  0.00 0.0 !
(=nc3h7/TSA88)
sc4h9+h=c4h8+h2             3.333E+13  0.00 0.0 !
(ALLARA 80/1.5)
sc4h9+h=t2c4h8+h2          5.000E+13  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
sc4h9+h=c2c4h8+h2          5.000E+13  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
```

```
c4h10+ac3h5=pc4h9+c3h6      7.943E+11  0.00 20500.0 !
WESTB.86
c4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh     3.000E+11  0.00 7000.0 !
FITZ 88
c4h10+o2=sc4h9+h2o         3.981E+13  0.00 47600.0 !
WESTB.86
c4h10+hsc4h9+h2            4.777E+06  2.50 7369.0 !
FIT 8/8/93
c4h10+o=sc4h9+oh           4.280E+05  2.60 2583.0 !
COHEN 86
c4h10+oh=sc4h9+h2o         7.234E+07  1.64 -246.0 !
TULLY 86
c4h10+h2=sc4h9+h2o2        4.000E+12  0.00 18150.0 !
FITZ 88
c4h10+ch3=sc4h9+ch4        2.189E+11  0.00 9600.0 !
FITZ 88
c4h10+c2h3=sc4h9+c2h4      7.943E+11  0.00 16800.0 !
WESTB.86
c4h10+c2h5=sc4h9+c2h6      1.000E+11  0.00 10400.0 !
WESTB.86
c4h10+ac3h5=sc4h9+c3h6     3.162E+11  0.00 16400.0 !
WESTB.86
c4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh     6.000E+11  0.00 7000.0 !
FITZ 88
c4h10+o2cho=pc4h9+ho2cho   1.680E+13  0.00 20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
c4h10+o2cho=sc4h9+ho2cho   1.120E+13  0.00 17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
```

```
#####
! c4h9 REACTIONS
#####
!*****
! 1) C-C bond scission
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!*****
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scission
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!pc4h9=c2h5+c2h4             2.500E+12  0.00 28500.0 !
(FITZ 28/06/2000)
pc4h9=c2h5+c2h4             2.500E+13  0.00 28824.0 !
Bikas
sc4h9=ch3+c3h6              2.000E+13  0.00 31000.0 !
DE 2404 CN
pc4h9=c3h6+ch3              1.260E+12  0.00 27026.0 !
Kerr Trotman
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scission
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
sc4h9+ch3=c4h8+ch4          8.000E+11  0.00 0.0 !
(ALLARA 80/1.25)
sc4h9+ch3=t2c4h8+ch4        1.000E+12  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
sc4h9+ch3=c2c4h8+ch4        1.000E+12  0.00 0.0 !
(ALLARA 80)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!pc4h9+o2=c4h9qjA           4.820E+36  -8.23 5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!sc4h9+o2=c4h9qjB           1.840E+45  -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
pc4h9+o2=c4h9qjA            9.000E+18  -2.50 0.0 !
sc4h9+o2=c4h9qjB            1.700E+19  -2.50 0.0 !
#####
! c4h9qj REACTIONS
#####
!*****
! 1) isomerisation to QOOH
! 2) dismutations with ho2
! ROOH formation
!*****
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOH
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
c4h9qjA=c4h8rBqA            3.300E+09  1.00 32500.0 !
IS 249 KB
c4h9qjA=c4h8rCqA            5.700E+08  1.00 25000.0 !
IS 250 KB
c4h9qjA=c4h8rDqA            1.500E+08  1.00 25000.0 !
IS 251 KB
c4h9qjB=c4h8rDqB            8.600E+08  1.00 28000.0 !
IS 652 KB
c4h9qjB=c4h8rAqB            5.000E+09  1.00 35500.0 !
IS 656 KB
c4h9qjB=c4h8rCqB            3.300E+09  1.00 32500.0 !
IS 685 KB
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
! ROOH formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
c4h9qjA+h2o=nc4h9o2h+o2    2.900E+11  0.00 1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c4h9qjB+h2o=nc4h9o2h+o2    2.900E+11  0.00 1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
#####
! c4h8rXqjY REACTIONS
```



#####  
! c4h8 REACTIONS  
#####

\*\*\*\*\*  
! 1) addition of h and Ch3  
! 2) addition of Oh  
! 3) addition of O  
! 4) addition of ho2  
! 5) decomposition by R  
! 6) isomerisation  
! 7) C-C breaking  
! 8) C-h breaking  
\*\*\*\*\*

c2c4h8=c4h6+h2 1.000E+13 0.00 65500.0 !  
(76RIC/mAR)

\*\*\*\*\*  
! 1) addition of h and Ch3  
\*\*\*\*\*

sc4h9=c4h8+h 2.000E+13 0.00 40400.0 !  
Nicolle

\*\*\*\*\*  
! 2) addition of Oh  
\*\*\*\*\*

!c4h8+oh=ch2o+nc3h7 3.440E+12 0.00 -928.0 !  
(89ATK\*RTI\*1.72)  
!c4h8+oh=ch3hco+c2h5 4.000E+11 0.00 -928.0 !  
(89ATK\*RTI/1.7)  
!c4h8+oh=c2h6+ch3co 1.000E+10 0.00 0.0 !  
Nicolle

c4h8+oh=ch2o+nc3h7 1.000E+12 0.00 0.0 !  
Curran

c4h8+oh=ch3hco+c2h5 1.000E+12 0.00 0.0 !  
Curran

c4h8+oh=ethco+ch3 1.000E+12 0.00 0.0 !  
Curran

c4h8+oh=ch3co+c2h6 5.000E+11 0.00 0.0 !  
Curran

c4h8+oh=c2h5co+ch4 5.000E+11 0.00 0.0 !  
Curran

t2c4h8+oh=ch3hco+c2h5 2.600E+13 0.00 0.0 !  
Curran

c2c4h8+oh=ch3hco+c2h5 2.600E+13 0.00 0.0 !  
Curran

\*\*\*\*\*  
! 3) addition of O  
\*\*\*\*\*

c4h8+o=c3h6+ch2o 7.230E+05 2.34 -1050.0 !  
(FITZ 86)

c4h8+o=ch3hco+c2h4 1.300E+13 0.00 850.0 !  
(FITZ 86)

c4h8+o=c2h5+ch3co 1.625E+13 0.00 850.0 !  
(FITZ 84)

c2c4h8+o=ic3h7+hco 6.030E+12 0.00 0.0 !  
(FITZ 86)  
c2c4h8+o=ch3hco+c2h4 1.000E+12 0.00 0.0 !  
(FITZ 86)

t2c4h8+o=ic3h7+hco 6.030E+12 0.00 0.0 !  
(FITZ86)  
t2c4h8+o=ch3hco+c2h4 1.000E+12 0.00 0.0 !  
(FITZ 86)

\*\*\*\*\*  
! 4) addition of ho2  
\*\*\*\*\*

c4h8+ho2=>ch2o+c3h6+oh 2.500E+12 0.00 14340.0 !  
(89WAL\*2.5)

\*\*\*\*\*  
! 5) decomposition by R  
\*\*\*\*\*

c4h8+o2=Cc4h7-1+ho2 4.000E+12 0.00 40000.0 !  
(WALKER 77EST\*RTI\*1.8-2.2)

!c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2 1.000E+11 0.00 17060.0 !  
(WALKER 77)

c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002

c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o 4.186E+06 2.00 -543.0 !  
(89ATK/1.5)

c4h8+o=Cc4h7-1+oh 2.600E+12 0.00 4500.0 !  
(WALKER 77)

c4h8+h=Cc4h7-1+h2 1.950E+13 0.00 4445.0 !  
(LOSER 89\*3)

c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4 1.000E+11 0.00 7300.0 !  
(ALLARA 80)

c4h8+c2h5=Cc4h7-1+c2h6 1.000E+11 0.00 8300.0 !  
(ALLARA 80)

c4h8+ac3h5=Cc4h7-1+c3h6 8.000E+10 0.00 12400.0 !  
(ALLARA 80)

c4h8+sc3h5=Cc4h7-1+c3h6 8.000E+10 0.00 12400.0 !  
(ALLARA 80)

c4h8+tc3h5=Cc4h7-1+c3h6 8.000E+10 0.00 12400.0 !  
(ALLARA 80)

c4h8+o2=Dc4h7-1+ho2 1.256E+13 0.00 49000.0 !  
idem c4h10->pc4h9 /2

c4h8+h=Dc4h7-1+h2 2.815E+07 2.00 7700.0 !  
idem c4h10->pc4h9 /2

c4h8+o=Dc4h7-1+oh 2.440E+06 2.40 5505.0 !  
idem c4h10->pc4h9 /2

c4h8+oh=Dc4h7-1+h2o 2.070E+07 1.73 753.0 !  
idem c4h10->pc4h9 /2

c4h8+ho2=Dc4h7-1+h2o2 8.500E+12 0.00 20460.0 !  
idem c4h10->pc4h9 /2

c4h8+ch3=Dc4h7-1+ch4 1.000E+11 0.00 7300.0 !  
(ALLARA 80)

c4h8+c2h5=Dc4h7-1+c2h6 5.000E+10 0.00 13400.0 !  
idem c4h10->pc4h9 /2

c4h8+ch3o=Dc4h7-1+ch3oh 1.500E+11 0.00 7000.0 !  
idem c4h10->pc4h9 /2

c2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o 9.000E+06 2.00 -60.0 !  
(89ATK)

c2c4h8+h=Cc4h7-1+h2 1.000E+13 0.00 3500.0 !  
(SUNDARAM 78)

c2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4 1.000E+11 0.00 8200.0 !  
(SUNDARAM 78)

t2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o 9.000E+06 2.00 -60.0 !  
(89ATK)

t2c4h8+h=Cc4h7-1+h2 5.000E+12 0.00 3500.0 !  
(ALLARA 80)

t2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4 1.000E+11 0.00 8200.0 !  
(SUNDARAM 78)

\*\*\*\*\*  
! 6) isomerisation  
\*\*\*\*\*

c4h8=c2c4h8 4.000E+11 0.00 60000.0 !  
(DENTE 83/5.5)

c4h8=t2c4h8 4.000E+11 0.00 60000.0 !  
(DENTE 83/5.5)

c2c4h8=t2c4h8 3.620E+13 0.00 61330.0 !  
(FITNIST 02/00)

\*\*\*\*\*  
! 7) C-C breaking  
\*\*\*\*\*

c4h8=ac3h5+ch3 1.500E+19 -1.00 73400.0 !  
(FITZ 88)

c4h8=c2h3+c2h5 1.000E+19 -1.00 96770.0 !  
(FITZ 88)

c2c4h8=sc3h5+ch3 2.000E+16 0.00 71300.0 !  
(SCHARFE 85)

t2c4h8=sc3h5+ch3 2.000E+16 0.00 71300.0 !  
(SCHARFE 85)

\*\*\*\*\*  
! 8) C-h breaking  
\*\*\*\*\*

c4h8=Cc4h7-1+h 4.078E+18 -1.00 97350.0 !  
(FITZ 86)

c2c4h8=Cc4h7-1+h 4.074E+18 -1.00 97350.0 !  
(FITZ 86)

t2c4h8=Cc4h7-1+h 4.074E+18 -1.00 97350.0 !  
(FITZ 86)

\*\*\*\*\*  
! Dc4h7-1 REACTIONS  
\*\*\*\*\*

Dc4h7-1=c2h4+c2h3 5.000E+13 0.00 38000.0 !  
(85SCHARFE)

Dc4h7-1=c4h6+h 1.000E+14 0.00 44000.0 !  
(RTI/16-2.2)

Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2 1.020E+12 0.00 22654.0 !  
(08/09/2000DV)

Dc4h7-1+h2o2=c4h6+h2o2 1.000E+12 0.00 0.0 !  
(=ac3h5+h/10)

!Dc4h7-1+h2o2=>ac3h5+ch2o+oh 1.000E+12 0.00 0.0 !

(Cc4h7-1 )

Dc4h7-1+oh=c4h6+h2o 4.000E+13 0.00 0.0 !  
(Cc4h7-1 )

Dc4h7-1+o=c4h6+oh 4.000E+13 0.00 0.0 !  
(Cc4h7-1 )

Dc4h7-1+h=c4h6+h2 3.160E+13 0.00 0.0 !  
(FITZ 86)

Dc4h7-1+ch3=c4h6+ch4 7.940E+12 0.00 0.0 !  
(SCHARFE 85)

Dc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4 4.000E+12 0.00 0.0 !  
(FITZ 86)

Dc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6 4.000E+12 0.00 0.0 !  
(FITZ 86)

Dc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4 5.000E+11 0.00 0.0 !  
(FITZ 86)

Dc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4 4.000E+12 0.00 0.0 !  
(=Cc4h7-1+c2h3)

Dc4h7-1+c3h5=c4h6+ac3h4 4.000E+12 0.00 0.0 !  
(=Cc4h7-1+c2h3)

Dc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6 6.300E+12 0.00 0.0 !  
(ALLARA 80)

Dc4h7-1+Dc4h7-1=c4h6+c4h8 3.160E+12 0.00 0.0 !  
(SCHARFE 85)

!Dc4h7-1+h2=c4h8+h 3.000E+12 0.00 15700.0 !  
(85SCHARFE)

!Dc4h7-1+c2h6=c4h8+c2h5 3.000E+13 0.00 12300.0 !  
(85SCHARFE)

Dc4h7-1+c2h4=c4h8+c2h3 1.000E+11 0.00 15000.0 !  
(85SCHARFE)

Dc4h7-1+c3h6=c4h8+ac3h5 1.000E+11 0.00 9800.0 !  
(85SCHARFE)

Dc4h7-1+c4h8=c4h8+Cc4h7-1 1.000E+11 0.00 8300.0 !  
(85SCHARFE)

Dc4h7-1+t2c4h8=c4h8+Cc4h7-1 2.000E+11 0.00 9800.0 !  
(85SCHARFE)

Dc4h7-1+c2c4h8=c4h8+Cc4h7-1 2.000E+11 0.00 9800.0 !  
(85SCHARFE)

c4h6+Dc4h7-1=nc4h5+c4h8 6.320E+02 3.13 20010.0 !  
(=Cc4h7-1)

c4h6+Dc4h7-1=ic4h5+c4h8 6.320E+02 3.13 18010.0 !  
(=Cc4h7-1)

Dc4h7-1+ho2=ac3h5+ch2o+oh 1.000E+12 0.00 0.0 !  
(Cc4h7-1 )

Dc4h7-1+ch3o2=ac3h5+ch3o+ch2o 1.000E+12 0.00 0.0 !  
(Cc4h7-1 )

Dc4h7-1+c2h5o2=ac3h5+c2h5o+ch2o 1.000E+12 0.00 0.0 !  
(Cc4h7-1 )

!Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2 1.000E+12 0.00 5020.0 !

!#####  
!But-1-en-3-yle radical reactions Cc4h7-1  
!#####

Cc4h7-1+o2=c4h6+ho2 1.020E+12 0.00 22654.0 !  
Ristori

Cc4h7-1=c4h6+h 1.200E+14 0.00 49300.0 !  
Nicolle

Cc4h7-1=c2h4+c2h3  
Konnov

Cc4h7-1+h2=c4h6+h2o2  
(13/6/97)

Cc4h7-1+ch=c4h6+h2o  
(21/05/97)

Cc4h7-1+o=c4h6+oh  
(21/05/97)

Cc4h7-1+h=c4h6+h2  
(FITZ 86)

Cc4h7-1+ch3=c4h6+ch4  
(SCHARFE 85)

Cc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4  
(FITZ 86)

Cc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6  
(FITZ 86)

Cc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4  
(FITZ 86)

Cc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4  
(FITZ 86)

Cc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4  
(FITZ 86)

Cc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4  
(=Cc4h7-1+c2h3)

Cc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4  
(=Cc4h7-1+c2h3)

Cc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6  
(ALLARA 80)

Cc4h7-1+ac3h5=c4h8+ac3h4  
(SCHARFE 85)

Cc4h7-1+ac3h5=>mhd  
(SCHARFE85)

Cc4h7-1+Cc4h7-1=c4h6+c4h8  
(SCHARFE 85)

Cc4h7-1+h2=>acrol+ch3+oh  
! Curran

Cc4h7-1+ch3o2=>acrol+ch3+ch3o  
! Curran

Cc4h7-1+c2h5o2=>acrol+ch3+c2h5o  
! Curran

!#####  
!#####  
! butyne reactions  
!#####

c3h3+ch3=butyne  
(87WU/KERN )

butyne+ho2=nc4h5+h2o2  
(ESTImEE)

butyne+ho2=ic4h5+h2o2  
(pc3h4)

butyne+oh=nc4h5+h2o  
(pc3h4)

butyne+oh=ic4h5+h2o  
(pc3h4)

butyne+oh=ch2co+c2h5  
(pc3h4)

butyne+o=c3h6+co

(87CVE)

butyne+h=ac3h4+ch3  
(95hID/hIG)

butyne+h=c2h5+c2h2  
(95hID/hIG)

butyne+h=ic4h5+h2  
(95hID/hIG)

butyne+h=nc4h5+h2  
(95hID/hIG)

butyne+ch3=ic4h5+ch4  
(95hID/hIG)

butyne+ch3=nc4h5+ch4  
(95hID/hIG)

butyn2=c4h6  
(95hID/hIG)

butyn2=meall  
(95hID/hIG)

butyn2+h=pc3h4+ch3  
(95hID/hIG)

butyne=meall  
(95hID/hIG)

!#####  
!#####  
! meall methylallene=buta-1,2-diene reactions  
!#####

meall=c4h6  
(95hID/hIG)

meall=c3h3+ch3  
(95hID/hIG)

meall+h=ac3h4+ch3  
(95hID/hIG)

meall+h=pc3h4+ch3  
(95hID/hIG)

meall+oh=ic4h5+h2o  
(95hID/hIG)

meall+h=ic4h5+h2

!#####  
!#####  
! c4h6 reactions  
!#####

ic3h7+c2h2=c4h6+ch3  
(88TSA)

c4h6=c2h4+c2h2  
(NIST)

c4h6=nc4h5+h  
(85DEA)

c4h6+o2=nc4h5+ho2  
(EST WALKER95)

c4h6+o2=ic4h5+ho2  
(EST WALKER95)

c4h6+h2=nc4h5+h2o2  
(Est Walker77)

c4h6+h2=ic4h5+h2o2  
(Est Walker77)

c4h6+oh=nc4h5+h2o  
(88LIU/MUL E>\*RTI/2.29)

c4h6+oh=ic4h5+h2o  
(88LIU/MUL E>\*RTI/2.17)

c4h6+o=ic4h5+oh  
(93ADU/FON-85CVE)

c4h6+o=nc4h5+oh  
(93ADU/FON-85CVE)

c4h6+h=pc3h4+ch3  
(RTI 26/06/2000/10)

c4h6+h=ac3h4+ch3  
(RTI 21/06/2000)

c4h6+h=nc4h5+h2  
(93hID/hIG)

c4h6+h=ic4h5+h2  
(93hID/hIG)

c4h6+ch3=nc4h5+ch4  
(93hID/hIG E>)

c4h6+ch3=ic4h5+ch4  
(93hID/hIG)

c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4  
(EST 14/4)

c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4  
(EST 14/4)

c4h6+Cc4h7-1=nc4h5+c4h8  
(EST 14/4)

c4h6+Cc4h7-1=ic4h5+c4h8  
(EST 14/4)

c4h6+oh=ch3hco+c2h3  
Exgas

c4h6+o=>ac3h5hco  
(85CVE\*2.14 RTI)

c4h6+ho2=>c4h6o2h  
(c2h4)

!#####  
!#####  
! hoc4h6 reactions  
!#####

hoc4h6=>ac3h5hco+h  
(c2h2oh/10)

!#####  
!#####  
! ac3h5hco reactions  
!#####

ac3h5hco=>c3h6+co  
(11/03/98)

ac3h5hco=>c2h4+ch2co  
(07/07/2000)

ac3h5hco+o=>c2h3o+c2h3o  
(c2h4)

ac3h5hco+oh=>ch2co+c2h3+h2o  
(c2h4)

ac3h5hco+ho2=>c2h3o+c2h3o+oh  
(c3h6\*5)

ac3h5hco+h=>ac3h5co+h2  
(ch3hco)

ac3h5hco+oh=>ac3h5co+h2o  
(ch3hco)

ac3h5hco+ho2=>ac3h5co+h2o2  
(ch3hco)

ac3h5hco+o=>ac3h5co+oh

(ch3hco)

ac3h5hco+ch3=>ac3h5co+ch4  
(ch3hco)

ac3h5hco+c2h3=>ac3h5co+c2h4  
(ch3hco+ch3)

ac3h5hco+ac3h5=>ac3h5co+c3h6  
(ch3hco+ch3)

ac3h5hco+oh=c2h3chcho+h2o  
Curran

ac3h5hco+ho2=c2h3chcho+h2o2  
Curran

ac3h5hco+ch3o2=c2h3chcho+ch3o2h  
Curran

!#####  
!#####  
! c4h6o2h reactions  
!#####

c4h6o2h=>acrol+oh+ch2  
(c2h4o2h)

c4h6o2h=>ac3h5hco+oh  
(c2h4o2h)

!#####  
!#####  
! ac3h5co reactions  
!#####

ac3h5co+h=>ac3h5hco  
(12/03/98)

ac3h5co+o2=>acrol+co+oh  
(12/11/97c2h2oh)

ac3h5co->ch2co+c2h3  
(7/5/97)

ac3h5co->co+c2h2+ch3  
(14/5/97 /2)

ac3h5co=>ac3h5+co  
Curran

!#####  
!#####  
! c2h3chcho reactions  
!#####

c2h3chcho+o=acrol+hco  
idem c5h7

c2h3chcho+ho2=oh+acrol+hco  
idem phch2

!#####  
!#####  
! ic4h5 reactions  
!#####

c2h3+c2h3=ic4h5+h  
FAhR 1991

ic4h5+h=ch3+c3h3 1.00E+14 0.0 0.0 ! (nn)

ic4h5+o2=c2h3co+ch2o (estimee) 2.00E+11 0.00 14000.0 !

ic4h5+o=>ch2co+c2h3 (c2h3+o <23/4/97) 1.00E+13 0.00 2000.0 !

ic4h5+ho2=c2co+c2h3+oh (c2h3+ho2<30/5/97) 1.00E+12 0.00 2000.0 !

ic4h5+ho2=>ac3h5co+oh (c2h3+ho2<23/4/97) 1.00E+13 0.00 2000.0 !

c3h6+ic4h5=ac3h5+c4h6 (c2h5 14/5/97) 1.00E+11 0.00 9800.0 !

ic4h5+c2h2=c4h6+c2h (20/07/2000) 1.80E+11 0.00 17300.0 !

ic4h5+c2o=c4h6+hco (20/07/2000) 4.00E+12 0.00 8840.0 !

#####  
! c4h5 reactions  
#####

nc4h5=c2h3+c2h2 (93hID/hIG) 5.00E+13 0.00 44000.0 !

nc4h5+o2=acrol+hco (26/6/97 \*2) 2.00E+11 0.00 14000.0 !

nc4h5+o=>ac3h5+co (c2h3+o <23/4/97) 1.00E+13 0.00 2000.0 !

nc4h5+oh=c4h4+h2o (MILLER 92) 2.00E+07 2.00 1000.0 !

nc4h5+ho2=>ac3h5+co+oh (c2h3+ho2 3/10/97\*) 1.00E+13 0.00 0.0 !

nc4h5+h=c4h4+h2 (LINDSTEDT 95\*RTI\*7.2-2.4) 1.00E+14 0.00 0.0 !

nc4h5+h=ic4h5+h (MILLER 92) 1.00E+14 0.00 0.0 !

nc4h5+c2h2=c4h6+c2h (20/07/2000) 1.80E+11 0.00 17300.0 !

nc4h5+c2o=c4h6+hco (20/07/2000) 4.00E+12 0.00 8840.0 !

c3h6+nc4h5=ac3h5+c4h6 (c2h5 14/5/97) 1.00E+11 0.00 9800.0 !

#####  
! c4h4 reactions  
#####

c4h4=c2h2+c2h2 (KURZ/FRA89) 3.20E+13 0.00 77100.0 !

c4h4+m=nc4h3+h+m (KURZ/FRA89) 1.00E+20 0.00 99300.0 !

c4h4=ic4h3+h (92hID/FRA89) 6.30E+13 0.00 87100.0 !

c4h4=c4h2+h2 (KURZ/FRA89) 1.26E+15 0.00 94700.0 !

c4h4+o2=nc4h3+ho2 (Est Walker95) 1.00E+13 0.00 63200.0 !

c4h4+o2=ic4h3+ho2 (Est Walker95) 1.00E+13 0.00 44640.0 !

c4h4+ho2=nc4h3+h2o2 (Estc4h6) 2.00E+11 0.00 12600.0 !

c4h4+ho2=ic4h3+h2o2 (Estc4h6) 1.00E+11 0.00 9920.0 !

c4h4+ho2=c3h3+hco+oh (=c2h4+ho2\*) 4.00E+11 0.00 8000.0 !

c4h4+oh=ic4h3+h2o (MILLER 92) 2.00E+07 2.00 2000.0 !

c4h4+oh=nc4h3+h2o (MILLER 92) 7.50E+06 2.00 5000.0 !

c4h4+o=ac3h4+co (LINDST95) 3.00E+13 0.00 1810.0 !

c4h4+h=ic4h3+h2 (Wang97\*RTI/26-8.8) 3.33E+05 2.53 9240.0 !

c4h4+h=nc4h3+h2 (MILLER 92) 2.00E+07 2.00 15000.0 !

c4h4+c2h=ic4h3+c2h2 (LINDST95) 3.98E+13 0.00 0.0 !

c4h4+c3h=ic4h3+c4h (c2h4) 1.66E+01 3.70 9499.0 !

c4h4+nc4h5=ic4h3+c4h6 (18/07/2000) 4.00E+11 0.00 5000.0 !

c4h4+ic4h5=ic4h3+c4h6 (18/07/2000) 4.00E+11 0.00 5000.0 !

#####  
! ic4h3 reactions  
#####

c2h2+c2h2=ic4h3+h (88DUR/AmO) 6.31E+13 0.00 41600.0 !

ic4h3+o2=ch2co+hcco (MILLER 92) 1.00E+12 0.00 0.0 !

ic4h3+oh=c4h2+h2o (MILLER 92) 3.00E+13 0.00 0.0 !

ic4h3+o=ch2co+c2h (MILLER 92) 2.00E+13 0.00 0.0 !

ic4h3+o=h2c4o+h (MILLER 92) 2.00E+13 0.00 0.0 !

ic4h3+h=c4h2+h2 (MILLER 92) 5.00E+13 0.00 0.0 !

ic4h3+c2h=ac3h4+c2h (MILLER 92) 2.00E+13 0.00 0.0 !

#####  
! nc4h3 reactions  
#####

nc4h3+oh=c4h2+h2o (LINDST95) 3.00E+13 0.00 0.0 !

nc4h3+h=c4h2+h2 (LINDST95) 5.00E+13 0.00 0.0 !

nc4h3+h=ic4h3+h (MILLER 92) 1.00E+14 0.00 0.0 !

#####  
! h2c4o reactions  
#####

#####

h2c4o+oh=ch2co+hcco (MILLER 92) 1.00E+07 2.00 2000.0 !

h2c4o+h=c2h2+hcco (MILLER 92) 5.00E+13 0.00 3000.0 !

#####  
! c4h2 reactions  
#####

c2h2+c2h=c4h2+h (91ShI/mIC) 1.82E+14 0.00 467.0 !

c4h2+m=c4h+h+m (78TAN/GAR) 3.50E+17 0.00 80065.0 !

c4h2+oh=h2c4o+h (MILLER 92) 6.66E+12 0.00 -410.0 !

c4h2+o=c3h2+co (MILLER 89) 1.20E+12 0.00 0.0 !

#####  
! c4h reactions  
#####

c4h+o2=c2h+co+co (FRENKLACH 87) 1.00E+14 0.00 0.0 !

#####  
! butanal REACTIONS  
#####

hco+nc3h7=nc3h7hco CO 5201 KB 5.20E+12 0.00 0.0 !

nc3h7hco+h=h2+c3h7co ALD 5337 4.00E+13 0.00 4200.0 !

nc3h7hco+oh=h2o+c3h7co ALD 5338 4.20E+12 0.00 500.0 !

nc3h7hco+ho2=h2o2+c3h7co ALD 5339 1.00E+12 0.00 10000.0 !

nc3h7hco+c3h=ch4+c3h7co ALD 5340 2.00E+06 5.60 2500.0 !

nc3h7hco+c2h5=c2h6+c3h7co ALD 5341 1.30E+12 0.00 8500.0 !

nc3h7hco+oh=c3h6cho-1+h2o Curran 5.27E+09 0.97 1586.0 !

nc3h7hco+ho2=c3h6cho-1+h2o Curran rev / 1.089E+09 0.96 21020.0 / 9.030E-01 3.65 7153.0 !

nc3h7hco+ch3o2=c3h6cho-1+ch3o2h Curran rev / 1.108E+00 3.31 -487.4 / 6.030E+12 0.00 19380.0 !

nc3h7hco+ch3o2=c3h6cho-1+ch3o2h Curran rev / 3.040E+13 -0.51 6628.0 /

c3h7co+M=co+nc3h7+M 8.64E+15 0.00 14400.0 !

c3h7co+ho2=>co2+oh+nc3h7 2.00E+13 0.00 0.0 !

c3h7co+o2=c3h7co3 1.20E+11 0.00 -1100.0

c3h7co3+ho2=c3h7co3h+o2 1.75E+10 0.00 -3275.0

c3h7co3h=c3h7co2+oh 5.01E+14 0.00 40150.0

nc3h7+co2=c3h7co2 2.00E+11 0.00 39360.0

#####  
! butanone REACTIONS  
#####

butanone+h=>h2+c2h5coch2 FCO 5402 2.70E+07 2.00 5000.0 !

butanone+oh=>h2o+c2h5coch2 FCO 5403 7.80E+06 2.00 -765.0 !

butanone+ho2=>h2o2+c2h5coch2 FCO 5404 1.20E+12 0.00 15500.0 !

butanone+ch3=>ch4+c2h5coch2 FCO 5405 6.00E+11 0.00 9600.0 !

butanone+ch3o2=>ch3o2h+c2h5coch2 FCO 5406 6.00E+11 0.00 9600.0 !

butanone+c2h5=>c2h6+c2h5coch2 FCO 5407 6.00E+11 0.00 11000.0 !

#####  
! ch3coc2h4p REACTIONS  
#####

c2h5coch2=ch2co+c2h5 rev / 1.57E+13 0.00 30000.0 / 2.11E+11 0.00 7350.0 /

c2h5coch2+o2=c2h5coch2o2 9.00E+18 -2.50

0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c2h5coch2o2+ho2=c2h5coch2o2h+o2 2.29E+11 0.00 -

1790.0 ! Atkinson et al., 2001

c2h5coch2o2h=c2h5coch2o+oh 1.50E+16 0.00

42500.0 ! 17 anc7, primary s

ch2o+c2h5co=c2h5coch2o 1.50E+11 0.00

11900.0 ! 18 anc7, alk to te

! c2h4+ch3co=ch3coc2h4p ! Curran 1.50E+11 0.00 8300.0

ch3coc2h4p=c2h4+ch3co 5.97E+12 0.00 20730.0

ch3coc2h4p+o2=ch3coc2h4o2 9.00E+18 -2.50

0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

ch3coc2h4o2+ho2=ch3coc2h4o2h+o2 2.29E+11 0.00 -

1790.0 ! Atkinson et al., 2001

ch3coc2h4o2h=ch3coc2h4o+oh 1.50E+16 0.00

42500.0 ! 17 anc7, primary s

ch2o+ch2coc3=ch3coc2h4o 1.50E+11 0.00

11900.0 ! 18 anc7, alk to te

ch3coc2h4p+o2=mvk+ho2 3.80E+10 0.00 -2000.0 !

idem pc4h9+o2

#####  
! c3h6cho-1 REACTIONS  
#####

! c2h4+ch2hco=c3h6cho-1 Curran 1.50E+11 0.00 8300.0 !





! 2) addition to o2  
! 3) o-o and c-c breaking  
! 4) o-o breaking  
! 5) o-rings formation  
! 6) c-o breaking  
! 7) c-c breaking  
! 8) c-h breaking  
! 9) oxidation  
!\*\*\*\*\*

c5h10rDqA=c3h6+c2h4o2h 2.000E+13 0.00 28700.0 !  
c5h10rEqA=c2h4+c3h6ooh-3 2.000E+13 0.00 28700.0 !

c5h10rEqB=c2h4+c3h6ooh2-1 2.000E+13 0.00 28700.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 1) isomerisation  
! c5h10rYqX=c5h10rZqX  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rEqA=c5h10rEqA 8.600E+08 1.00 19800.0 !  
IS 310 KB

c5h10rDqA=c5h10rEqA 5.700E+08 1.00 15300.0 !  
IS 311 KB

c5h10rEqA=c5h10rEqA 9.900E+07 1.00 10000.0 !  
IS 312 KB

c5h10rEqB=c5h10rDqB 5.700E+08 1.00 17300.0 !  
IS 513 KB

c5h10rEqB=c5h10rEqB 1.500E+08 1.00 14500.0 !  
IS 514 KB

c5h10rEqB=c5h10rEqB 2.900E+08 1.00 13300.0 !  
IS 515 KB

c5h10rEqB=c5h10rEqB 5.700E+08 1.00 17300.0 !  
IS 658 KB

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 2) addition to o2  
! c5h10rYqX+c5h10rYqX  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rEqA=c5h10rEqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqA=c5h10rEqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqA=c5h10rEqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqA=c5h10rEqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqA=c5h10rEqA 4.820E+36 -8.23 5167.0 !  
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

c5h10rEqB=c5h10rEqB 4.820E+36 -8.23 5167.0 !  
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

c5h10rEqB=c5h10rEqB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqB=c5h10rEqB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqB=c5h10rEqB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqB=c5h10rEqB 4.820E+36 -8.23 5167.0 !  
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

OR 2447 CR c5h10rEqA=oh+c5h10o#6 1.700E+08 0.00 1950.0 !  
OR 2448 CR

c5h10rEqB=oh+c5h10o#3 6.100E+11 0.00 17950.0 !  
OR 2495 CR

c5h10rEqB=oh+c5h10o#3 6.100E+11 0.00 17950.0 !  
OR 2496 CR

c5h10rEqB=oh+c5h10o#4 9.200E+10 0.00 16600.0 !  
OR 2497 CR

c5h10rEqB=oh+c5h10o#5 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
OR 2498 CR

c5h10rEqB=oh+c5h10o#4 9.200E+10 0.00 16600.0 !  
OR 2561 CR

c5h10rEqB=oh+c5h10o#3 6.100E+11 0.00 17950.0 !  
OR 2567 CR

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 6) c-o breaking  
! alkene formation  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rEqB=ho2+c5h10 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 1967 CR

c5h10rEqB=ho2+c5h10 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 1776 CR

c5h10rEqB=ho2+c5h10 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2382 CR

c5h10rEqB=ho2+c5h10 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2382 CR

c5h10rEqB=ho2+c5h10 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 1969 CR

c5h10rEqB=ho2+c5h10 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 1969 CR

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! c5h10rYqX REACTIONS  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! ketohydroperoxides formation

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgC 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgD 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgE 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgC 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgD 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgE 4.945E+07 1.00 19000.0 !

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgC 4.820E+36 -8.23 5167.0 !  
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgA 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgA 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgA 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.500E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.050E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgC 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgC 1.700E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgC 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 3) o-o and c-c breaking  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 5.000E+13 0.00 25500.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 4) o-o breaking  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.000E+09 0.00 7500.0 !  
DE 1966 CW

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.000E+09 0.00 7500.0 !  
DE 2299 CW

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 5) o-rings formation  
! (o-o breaking)  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 6.100E+11 0.00 17950.0 !  
OR 2445 CR

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 9.200E+10 0.00 16600.0 !  
OR 2446 CR

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
OR 2447 CR

7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol

! c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB REACTIONS  
! c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB REACTIONS  
! c5h10rEqB=oh+c5h9oAgB REACTIONS

! ketohydroperoxide decomposition  
! hydroperoxides decomposition

nc5h10rEqB=oh+c5h9oAgB 1.500E+16 0.00 42000.0 !  
DKh 4880

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.500E+16 0.00 42000.0 !  
DKh 4888

c5h9e2qC=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.500E+16 0.00 42000.0 !  
DKh 4896

! c5h9oAgB REACTIONS  
! c5h9oAgB REACTIONS  
! c5h9oAgB REACTIONS

! ketohydroperoxide decomposition  
! ketohydroperoxide decomposition

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9oAgB=oh+c5h8o+c2h4+c2h3 1.000E+16 0.00 43000.0 !

c5h9o9aqE=oh+ch2o+c3h6cho-1 7.500E+15 0.00 44500.0 !  
c5h9o9aqA=oh+ch2o+c3h7co 7.500E+15 0.00 44500.0 !  
c5h9o9aqC=oh+ch3co+ethco 7.500E+15 0.00 44500.0 !  
c5h9o9aqD=oh+ch3co+ch2coch3 7.500E+15 0.00 44500.0 !  
c5h9o9aqE=oh+ch3co2h4p+ch2o 7.500E+15 0.00 44500.0 !  
c5h9o9CqA=oh+c2h5coch2+ch2o 7.500E+15 0.00 44500.0 !  
c5h9o9CqB=oh+c2h5co+ch3hco 7.500E+15 0.00 44500.0 !

#####  
! c5h10o#x REACTIONS  
!#####  
#####

!\*\*\*\*\*  
! O-ring decomposition  
!\*\*\*\*\*

c5h10o#3+h=>h2+ch2co+ch3+c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
DOR 4959  
c5h10o#3+oh=>h2o+ch2co+ch3+c2h4 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
DOR 4960  
c5h10o#3+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
DOR 4961  
c5h10o#3+ch3=>ch4+ch2co+ch3+c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 4962  
c5h10o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 4963  
c5h10o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
DOR 4964  
c5h10o#3+o=>oh+hco+2c2h4 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
DOR 5108  
c5h10o#4+h=>h2+hco+2c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
DOR 5013  
c5h10o#4+oh=>h2o+c2h5coc2h4p 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
c5h10o#4+oh=>h2o+ac3h5hco+ch3 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
c5h10o#4+oh=>h2o+hco+c4h8 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
c5h10o#4+ho2=>h2o2+hco+2c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
DOR 5015  
c5h10o#4+ch3=>ch4+hco+2c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 5016  
c5h10o#4+ch3o2=>ch3o2h+hco+2c2h4 4.500E+12 0.00 17500.0 !  
DOR 5017  
c5h10o#4+c2h5=>c2h6+hco+2c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
DOR 5018  
c5h10o#4+o=>oh+hco+2c2h4 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
DOR 5109  
c5h10o#6+h=>h2+ch2ch2hco+c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
DOR 5025  
c5h10o#6+oh=>h2o+ch2ch2hco+c2h4 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
DOR 5026  
c5h10o#6+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
DOR 5027  
c5h10o#6+ch3=>ch4+ch2ch2hco+c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 5028  
c5h10o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2ch2hco+c2h4 4.500E+12 0.00 17500.0 !  
DOR 5029  
c5h10o#6+c2h5=>c2h6+ch2ch2hco+c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
DOR 5030

! 4) addition of ho2  
! 5) decomposition by R  
!\*\*\*\*\*

c5h10=c2h5+ac3h5 9.173E+20 -1.63 73990.0 !  
Westbrook 2009  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 1) addition of h and ch3  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
c5h10+ch3=nc3h7+c3h6 9.600E+10 0.00 8000.0 !  
Buda  
c2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8 1.700E+11 0.00 7400.0 !  
ROL 5175  
t2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8 1.700E+11 0.00 7400.0 !  
ROL 5175  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 2) addition of Oh  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
c5h10+oh=pc4h9+ch2o 1.000E+11 0.00 0.0 !  
Curran 1998  
c5h10+oh=nc3h7+ch3hco 1.000E+11 0.00 0.0 !  
Curran 1998  
c2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco 1.000E+12 0.00 0.0 !  
t2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco 1.000E+12 0.00 0.0 !  
c2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9 1.000E+12 0.00 0.0 !  
t2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9 1.000E+12 0.00 0.0 !  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 3) addition of O  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
c5h10+o=pc4h9+hco 1.000E+11 0.00 0.0 !  
Curran 1998  
c5h10+o=nc3h7+ch3co 1.000E+11 0.00 0.0 !  
Curran 1998  
c2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4 3.400E+07 1.83 550.0 !  
AOZ 5222  
t2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4 3.400E+07 1.83 550.0 !  
AOZ 5222  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 5) decomposition by R  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
c5h10+h=h2+Cc5h9-1 5.400E+04 2.50 -1900.0 !  
Buda 2 allylic H  
c5h10+oh=h2o+Cc5h9-1 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c5h10+ho2=Cc5h9-1+h2o2 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c5h10+ch3=ch4+Cc5h9-1 1.000E+11 0.00 7300.0 !  
Buda  
c5h10+ch3o2=ch3o2h+Cc5h9-1 1.000E+12 0.00 14550.0 !  
Buda  
c5h10+c2h5=c2h6+Cc5h9-1 4.400E+00 3.50 4140.0 !  
Buda  
c5h10+o=oh+Cc5h9-1 8.800E+10 0.70 3250.0 !  
Buda

c5h10o#6+o=>oh+ch2ch2hco+c2h4 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
DOR 5111  
!c5h10o#5+h=h2+Ac5h9o#5 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
!  
!c5h10o#5+oh=h2o+Ac5h9o#5 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
!  
!c5h10o#5+ho2=h2o2+Ac5h9o#5 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
!  
!c5h10o#5+ch3=ch4+Ac5h9o#5 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
!  
!c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+Ac5h9o#5 4.500E+12 0.00 17500.0 !  
!  
!c5h10o#5+c2h5=c2h6+Ac5h9o#5 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
!  
!c5h10o#5+o=oh+Ac5h9o#5 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
!

c5h10o#5+h=h2+c4h8hco-2 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
c5h10o#5+oh=h2o+c4h8hco-2 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
c5h10o#5+h2o=h2o2+c4h8hco-2 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
c5h10o#5+ch3=ch4+c4h8hco-2 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+c4h8hco-2 4.500E+12 0.00 17500.0 !  
c5h10o#5+c2h5=c2h6+c4h8hco-2 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
c5h10o#5+o=oh+c4h8hco-2 7.800E+13 0.00 5200.0 !

!c5h10o#5+h=h2+Dc5h9o#5 1.350E+07 2.00 5000.0 !  
!  
!c5h10o#5+oh=h2o+Dc5h9o#5 3.900E+06 2.00 -765.0 !  
!  
!c5h10o#5+ho2=h2o2+Dc5h9o#5 6.000E+11 0.00 15500.0 !  
!  
!c5h10o#5+ch3=ch4+Dc5h9o#5 3.000E+11 0.00 9600.0 !  
!  
!c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+Dc5h9o#5 2.250E+12 0.00 17500.0 !  
!  
!c5h10o#5+c2h5=c2h6+Dc5h9o#5 3.000E+11 0.00 11000.0 !  
!  
!c5h10o#5+o=oh+Dc5h9o#5 3.900E+13 0.00 5200.0 !  
!

c5h10o#5+h=h2+c3h6coch3-1 1.350E+07 2.00 5000.0 !  
c5h10o#5+oh=h2o+c3h6coch3-1 3.900E+06 2.00 -765.0 !  
c5h10o#5+ho2=h2o2+c3h6coch3-1 6.000E+11 0.00 15500.0 !  
c5h10o#5+ch3=ch4+c3h6coch3-1 3.000E+11 0.00 9600.0 !  
c5h10o#5+ch3o2=ch3o2h+c3h6coch3-1 2.250E+12 0.00 17500.0 !  
c5h10o#5+c2h5=c2h6+c3h6coch3-1 3.000E+11 0.00 11000.0 !  
c5h10o#5+o=oh+c3h6coch3-1 3.900E+13 0.00 5200.0 !

Ac5h9o#5=c3h6+c2hco 5.000E+13 0.00 28800.0 !  
!Dc5h9o#5=c3h6coch3-1 5.000E+13 0.00 28800.0 !

#####  
! c5h10 REACTIONS  
!#####  
#####

!\*\*\*\*\*  
! 1) addition of h and ch3  
! 2) addition of Oh  
! 3) addition of O

c5h10+h=Dc5h9-1+h2 9.000E+06 2.00 5000.0 !  
c5h10+oh=Dc5h9-1+h2o 1.000E+06 2.00 -597.0 !  
idem Alkanes  
c5h10+ho2=Dc5h9-1+h2o2 2.000E+04 2.50 14208.0 !  
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365  
!c5h10+o=Dc5h9-1+oh 1.130E+03 3.30 1650.0 !  
!c5h10+ch3=Dc5h9-1+ch4 8.000E+11 0.00 9500.0 !  
c5h10+h=Ec5h9-1+h2 2.850E+07 2.00 7700.0 !  
c5h10+oh=Ec5h9-1+h2o 7.050E+06 1.80 974.0 !  
idem alkanes  
c5h10+ho2=Ec5h9-1+h2o2 1.800E+04 2.50 16683.0 !  
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365  
!c5h10+o=Ec5h9-1+oh 4.360E+06 2.40 5500.0 !  
!c5h10+ch3=Ec5h9-1+ch4 1.300E12 0.00 11600.0 !

sc3h5+c2h5=c2c5h10 1.000E+13 0.00 0.0 !  
TER 5452  
sc3h5+c2h5=t2c5h10 1.000E+13 0.00 0.0 !  
TER 5452

#####  
! c5h9-1 REACTIONS  
!#####  
#####

!C5h9-1=c4h6+ch3 2.500E+13 0.00 45000.0 !  
(FITZ94) 25/06/04  
!C5h9-1=c4h6+ch3 1.339E+15 -0.52 38320.0 !  
Curran  
Cc5h9-1=c4h6+ch3 6.500E+12 0.00 38200.0 !  
Buda  
!Dc5h9-1=c5h8-13+h 1.200E+13 0.00 27600.0 !  
Dc5h9-1=c5h8-13+h 3.200E+13 0.00 34800.0 !  
Buda  
!Ec5h9-1=ac3h5+c2h4 2.500E+13 0.00 45000.0 !  
Curran  
!Ec5h9-1=ac3h5+c2h4 1.000E+13 0.00 30000.0 !  
Ristori  
Ec5h9-1=ac3h5+c2h4 3.300E+13 0.00 22500.0 !  
Buda  
Cc5h9-1+h=c5h10 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(RTI)  
Cc5h9-1+h=c2c5h10 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(RTI)  
Cc5h9-1+h=t2c5h10 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(RTI)  
!Cc5h9-1=c5h8-13+h 4.000E+13 0.00 47000.0 !  
(ESTIMEE) 22/06/04  
Cc5h9-1=c5h8-13+h 1.500E+13 0.00 50500.0 !  
Buda  
Cc5h9-1+o2=c5h8-13+ho2 5.900E+05 0.00 0.0 !  
(SIBAL/WAL 753K) 23/06/04  
Cc5h9-1+ho2=>acrol+c2h5+oh 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(EST/RAD+ho2)/2 Ristori 23/06/04  
Cc5h9-1+h=c5h8-13+h2 3.160E+13 0.00 0.0 !  
(EST Cc4h7-1+h)  
Cc5h9-1+ch3=c5h8-13+ch4 1.000E+13 0.00 0.0 !  
( mIChAEL85)

Cc5h9-1+c2h3=c5h8-13+c2h4 (ESTImEE) 4.000E+12 0.00 0.0 !

Cc5h9-1+c2h5=c5h8-13+c2h6 (ESTImEE) 4.000E+12 0.00 0.0 !

Cc5h9-1+ac3h5=c5h8-13+c3h6 (ESTImEE) 23/06/04 1.330E+12 0.00 0.0 !

!#####  
!#####  
!\*\*\*\* Penta-1,3-diene reactions c5h8-13 \*\*\*\*  
!#####

nc4h5+ch3=c5h8-13 (EST 22/4/97) 2.000E+13 0.00 0.0 !

sc3h5+c2h3=c5h8-13 (15/10/96) 1.000E+13 0.00 0.0 !

ac3h5+c2h3=c5h8-13 (15/10/96) 1.000E+13 0.00 0.0 !

ic4h5+ch3=c5h8-13 (6/10/97c2h6/5) 4.800E+37 -7.581 11359.0 !

c5h8-13+o2=acrol+ch3hco (EST/c2h2+o2) 2.000E+08 1.50 30200.0 !

c5h8-13+hco2=acrol+c2h4+oh (EST/ac3h4+hco2) 5.000E+11 0.00 19000.0 !

c5h8-13+hco2=>c4h6+ch2o+ch (EST/ac3h4+hco2) 5.000E+11 0.00 19000.0 !

c5h8-13+oh=ch3hco+ac3h5 (EST/c4h6+oh) 6.000E+12 0.00 -393.0 !

c5h8-13+oh=ch2o+Cc4h7-1 (EST/c4h6+oh) 6.000E+12 0.00 -393.0 !

c5h8-13+o=acrol+c2h4 (EST/c4h6+o) 4.500E+08 1.45 -858.0 !

c5h8-13+o=ch2o+c4h6 (EST/c4h6+o) 4.500E+08 1.45 -858.0 !

c5h8-13+h=c5h7+h2 (mARINOV 96) 7.000E+06 2.00 0.0 !

c5h8-13+h=ac3h5+c2h4 (mARINOV 96) 3.350E+08 1.50 2000.0 !

c5h8-13+oh=c5h7+h2o (mARINOV 96) 7.000E+06 2.00 0.0 !

c5h8-13+hco2=c5h7+h2o2 (15/10/97c4h6) 2.000E+11 0.00 12600.0 !

c5h8-13+ch3=c5h7+ch4 (12/11/97c4h6) 2.000E+14 0.00 22800.0 !

c5h8-14+oh=c5h7+h2o idem c5h8-13 3.000E+06 2.00 -1520.0 !

c5h8-14+h=c5h7+h2 5.500E+04 2.50 -1900.0 !

c5h8-14+o=c5h7+oh 9.000E+10 0.70 3250.0 !

c5h8-14+hco2=c5h7+h2o2 7.500E+03 2.60 12400.0 !

c5h8-14+ch3=c5h7+ch4 1.000E+11 0.00 7300.0 !

!#####  
!#####  
!\*\*\*\* Penta-1,3-dienyle radical reactions c5h7 \*\*\*\*  
!#####

c5h7+o=acrol+c2h3 2.000E+14 0.0 0.0 !

(mARINOV 96)  
c5h7+h=c5h8-13 (mARINOV 96) 1.000E+14 0.0 0.0 !

c5h7=CPD+h (08/09/2000) 2.000E+11 0.0 18000.0 !

c5h7+cyc6h12=c5h8-13+cyc6h11 (08/09/2000) 1.000E+12 0.0 10000.0 !

!#####  
!#####  
! pentanal REACTIONS  
!#####

nc4h9hco+h=h2+nc4h9co ALD 5342 4.000E+13 0.00 4200.0 !

nc4h9hco+oh=h2o+nc4h9co ALD 5343 4.200E+12 0.00 500.0 !

nc4h9hco+hco2=h2o2+nc4h9co ALD 5344 1.000E+12 0.00 10000.0 !

nc4h9hco+ch3=ch4+nc4h9co ALD 5345 2.000E-06 5.60 2500.0 !

nc4h9hco+c2h5=c2h6+nc4h9co ALD 5346 1.300E+12 0.00 8500.0 !

nc4h9co+M=co+pc4h9+M 8.640E+15 0.00 14400.0 !

nc4h9co+hco2=>co2+oh+pc4h9 2.000E+13 0.00 0.0 !

!#####  
! c4h8hco-2  
!#####

c4h8hco-2=c3h6+ch2hco 2.000E+13 0.00 24367.3 !

selon Dean dh+7000 c4h8hco-2+o2=c4h7hco-1+hco2 (sc4h9+o2=c4h8+hco2) 7.500E+09 0.00 -2000.0 !

c4h8hco-2+o2=c4h7hco-2+hco2 (sc4h9+o2=2c4h8+hco2) 1.800E+10 0.00 -2000.0 !

!#####  
!#####  
! pent-4-enal REACTIONS  
!#####

c4h7hco-1+h=h2+c4h7co-1 ALD 5342 4.000E+13 0.00 4200.0 !

c4h7hco-1+oh=h2o+c4h7co-1 ALD 5343 4.200E+12 0.00 500.0 !

c4h7hco-1+hco2=h2o2+c4h7co-1 ALD 5344 1.000E+12 0.00 10000.0 !

c4h7hco-1+ch3=ch4+c4h7co-1 ALD 5345 2.000E-06 5.60 2500.0 !

c4h7hco-1+c2h5=c2h6+c4h7co-1 ALD 5346 1.300E+12 0.00 8500.0 !

c4h7co-1=>co+Dc4h7-1 Curran c2h5co=c2h5+co ! COR 5374 2.000E+13 0.00 0.0

c4h7co-1+hco2=>co2+oh+Dc4h7-1 !

c4h7hco-2+h=h2+c4h7co-2 4.000E+13 0.00 4200.0 !

ALD 5342  
c4h7hco-2+oh=h2o+c4h7co-2 ALD 5343 4.200E+12 0.00 500.0 !

c4h7hco-2+hco2=h2o2+c4h7co-2 ALD 5344 2.000E-06 5.60 2500.0 !

c4h7hco-2+ch3=ch4+c4h7co-2 ALD 5345 2.000E-06 5.60 2500.0 !

c4h7hco-2+c2h5=c2h6+c4h7co-2 ALD 5346 1.300E+12 0.00 8500.0 !

c4h7co-2=>co+Cc4h7-1 Curran c2h5co=c2h5+co ! COR 5374 2.000E+13 0.00 0.0

c4h7co-2+hco2=>co2+oh+Cc4h7-1 !

!#####  
!#####  
! 2-pentanone REACTIONS  
!#####

c3h7coch3+oh=c3h6coch3-1+h2o Curran 2.065E+07 1.73 753.0 !

c3h7coch3+hco2=c3h6coch3-1+h2o2 rev / 3.604E+06 1.75 20170.0 / 2.380E+04 2.55 16490.0 !

c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-1+ch3o2h Curran rev / 2.465E+04 2.24 4442.0 / 3.010E+12 0.00 19380.0 !

c3h7coch3+o=c3h6coch3-1+oh rev / 1.281E+13 -0.49 6607.0 / 2.250E+13 0.00 7700.0 !

c3h7coch3+h=c3h6coch3-1+h2 Curran 9.160E+06 2.00 7700.0 !

c3h7coch3+o2=c3h6coch3-1+hco2 Curran 2.050E+13 0.00 51310.0 !

c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-1+ch4 Curran 3.190E+01 3.17 7172.0 !

c3h7coch3+ch3o=c3h6coch3-1+ch3oh Curran 2.170E+11 0.00 6460.0 !

c3h7coch3+c2h3=c3h6coch3-1+c2h4 Curran 5.000E+11 0.00 10400.0 !

c3h7coch3+c2h5=c3h6coch3-1+c2h6 Curran 5.000E+10 0.00 13400.0 !

c3h7coch3+oh=c3h6coch3-2+h2o Curran 3.615E+07 1.64 -247.0 !

c3h7coch3+hco2=c3h6coch3-2+h2o2 rev / 3.668E+05 2.01 21660.0 / 5.600E+12 0.00 17700.0 !

c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-2+ch3o2h rev / 3.373E+11 0.05 8142.0 / 1.990E+12 0.00 17050.0 !

c3h7coch3+oh=c3h6coch3-3+h2o ! rev / 4.926E+11 -0.13 6774.0 /

c3h7coch3+oh=c3h6coch3-3+h2o Curran 8.450E+11 0.00 -228.0 !

c3h7coch3+hco2=c3h6coch3-3+h2o2 rev / 2.368E+13 -0.28 28700.0 / 2.000E+11 0.00 8698.0 !

c3h7coch3+ch3o2=c3h6coch3-3+ch3o2h rev / 3.327E+13 -0.60 6160.0 / 2.000E+12 0.00 15250.0 !

! rev / 1.367E+15 -0.78 11990.0 / 3.070E+13 0.00 3400.0 !

Curran c3h7coch3+h=c3h6coch3-3+h2 4.460E+06 2.00 3200.0 !

Curran c3h7coch3+o2=c3h6coch3-3+hco2 1.550E+13 0.00 41970.0 !

Curran c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-3+ch4 1.740E+00 3.46 3680.0 !

Curran c3h7coch3+ch3o=c3h6coch3-3+ch3oh 1.450E+11 0.00 2771.0 !

Curran c3h7coch3+c2h3=c3h6coch3-3+c2h4 3.000E+11 0.00 3400.0 !

Curran c3h7coch3+c2h5=c3h6coch3-3+c2h6 3.000E+10 0.00 8600.0 !

Curran c3h7coch3+oh= nc3h7coch2+h2o 5.100E+11 0.00 1192.0 !

Curran c3h7coch3+hco2=nc3h7coch2+h2o2 rev / 9.286E+13 -0.74 27730.0 / 2.380E+04 2.55 14690.0 !

Curran c3h7coch3+ch3o2=nc3h7coch2+ch3o2h rev / 2.572E+07 1.48 9762.0 / 3.010E+12 0.00 17580.0 !

Curran c3h7coch3+o=nc3h7coch2+oh rev / 1.337E+16 -1.25 11930.0 / 5.000E+12 0.00 5962.0 !

Curran c3h7coch3+h=nc3h7coch2+h2 9.300E+12 0.00 6357.0 !

Curran c3h7coch3+o2=nc3h7coch2+hco2 2.050E+13 0.00 49150.0 !

Curran c3h7coch3+ch3=nc3h7coch2+ch4 1.620E+11 0.00 9630.0 !

Curran c3h7coch3+ch3o=nc3h7coch2+ch3oh 2.170E+11 0.00 4660.0 !

Curran c3h7coch3+c2h3=nc3h7coch2+c2h4 ! Curran 6.150E+10 0.00 4278.0 !

Curran c3h7coch3+c2h5=nc3h7coch2+c2h6 ! Curran 5.000E+10 0.00 11600.0 !

c3h6coch3-1+o2=ch3coc3h6o2-1 Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 9.000E+18 -2.50 0.0 !

ch3coc3h6o2-1+hco2=ch3coc3h6o2h-1+o2 Atkinson et al., 2001 170-186 (ks) 0.00 -1790.0 !

ch3coc3h6o2h-1=ch3coc3h6o-1+oh 1.500E+16 0.00

42500.0 ! 17 anc7, primary s ch2o+ch3coc2h4p=ch3coc3h6o-1 1.500E+11 0.00 11900.0 !

18 anc7, alk to te

c3h6coch3-1=c2h4+ch2coch3 Curran 2.904E+16 -1.21 27000.0 !

c3h6coch3-2=c3h6+ch3co rev / 1.000E+11 0.00 8600.0 / 2.719E+16 -1.05 25590.0 !

Curran c3h6coch3-3=mvk+ch3 rev / 1.000E+11 0.00 7800.0 / 9.615E+15 -0.75 32390.0 !

Curran nc3h7coch2=nc3h7+ch2co rev / 1.000E+11 0.00 7800.0 / 1.226E+18 -1.40 43450.0 !

rev / 1.000E+11 0.00 11600.0 !

nc3h7coch2+o2=nc3h7coch2o2 9.000E+18 -2.50

0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)

nc3h7coch2o2+hco2=nc3h7coch2o2+h2o 2.290E+11 0.00 -1790.0 !

Atkinson et al., 2001  
nc3h7coch2o2h=nc3h7coch2o+oh  
17 anc7, primary s  
ch2o+c3h7co=nc3h7coch2o  
11900.0 ! 18 anc7, alk to te

1.500E+16 0.00 42500.0 !  
1.500E+11 0.00

c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4p+h2o  
Curran 1.054E+10 0.97 1586.0 !  
! rev / 1.194E+09 0.95 21030.0 /  
c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4p+h2o2  
Curran 4.760E+04 2.55 16490.0 !  
! rev / 3.201E+04 2.20 4472.0 /  
c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4p+ho2  
Curran 4.100E+13 0.00 51310.0 !  
! rev / 1.949E+10 0.31 -1882.0 /  
c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4p+h2  
Curran 1.832E+07 2.00 7700.0 !  
! rev / 4.794E+05 1.98 11990.0 /  
!c2h5coc2h5+c2h3=c2h5coc2h4p+c2h4  
Curran 1.000E+12 0.00 10400.0 !  
! rev / 3.850E+08 0.81 14040.0 /  
!c2h5coc2h5+c2h5=c2h5coc2h4p+c2h6  
Curran 1.000E+11 0.00 13400.0 !  
! rev / 1.070E+13 -0.58 14000.0 /  
!c2h5coc2h5+ch3o=c2h5coc2h4p+ch3oh  
Curran 4.340E+11 0.00 6460.0 !  
! rev / 5.475E+09 0.00 9020.0 /  
!c2h5coc2h5+ch3o2=c2h5coc2h4p+ch3o2h  
Curran 6.020E+12 0.00 19380.0 !  
! rev / 1.664E+13 -0.52 6642.0 /

c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4s+h2o  
Curran 1.690E+12 0.00 -228.0 !  
! rev / 3.296E+13 -0.32 28740.0 /  
c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4s+h2o2  
Curran 4.000E+11 0.00 8698.0 !  
! rev / 4.631E+13 -0.65 6200.0 /  
c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4s+ho2  
Curran 3.100E+13 0.00 41970.0 !  
! rev / 2.537E+12 0.00 -1702.0 /  
c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4s+h2  
Curran 8.960E+06 2.00 3200.0 !  
! rev / 4.036E+07 1.68 17010.0 /  
!c2h5coc2h5+c2h3=c2h5coc2h4s+c2h4  
Curran 6.000E+11 0.00 5600.0 !  
! rev / 3.976E+10 0.50 18760.0 /  
!c2h5coc2h5+c2h5=c2h5coc2h4s+c2h6  
Curran 6.000E+10 0.00 8600.0 !  
! rev / 1.105E+15 -0.89 18720.0 /  
!c2h5coc2h5+ch3o=c2h5coc2h4s+ch3oh  
Curran 2.900E+11 0.00 2771.0 !  
! rev / 6.298E+11 -0.30 14850.0 /  
!c2h5coc2h5+ch3o2=c2h5coc2h4s+ch3o2h  
Curran 4.000E+12 0.00 15250.0 !  
! rev / 1.903E+15 -0.83 12030.0 /

c2h5coc2h4s=c2h5coc2h3+h  
Curran 8.704E+16 -0.82 42130.0 !  
! rev / 1.300E+13 0.00 1560.0 /  
c2h5coc2h4p=c2h5coc2h4o  
Curran 1.548E+17 -1.46 27840.0 !  
! rev / 7.000E+10 0.00 9600.0 /

c2h5coc2h4p+o2=c2h5coc2h4o2  
0.0 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
c2h5coc2h4o2+ho2=c2h5coc2h4o2h+o2  
Curran 2.290E+11 0.00 -1790.0 !

Atkinson et al., 2001  
c2h5coc2h4o2h=c2h5coc2h4o+oh  
17 anc7, primary s  
ch2o+c2h5coc2h4o2h=c2h5coc2h4o  
11900.0 ! 18 anc7, alk to te

1.500E+16 0.00 42500.0 !  
1.500E+11 0.00

!pentanone+h=h2+nc3h7coch2  
! FCO 5414 2.700E+07 2.00 5000.0  
!pentanone+oh=h2o+nc3h7coch2  
! FCO 5415 7.800E+06 2.00 -765.0  
!pentanone+ho2=h2o2+nc3h7coch2  
! FCO 5416 1.200E+12 0.00 15500.0  
!pentanone+ch3=ch4+nc3h7coch2  
! FCO 5417 6.000E+11 0.00 9600.0  
!pentanone+ch3o2=ch3o2h+nc3h7coch2  
! FCO 5418 6.000E+11 0.00 9600.0  
!pentanone+c2h5=c2h6+nc3h7coch2  
! FCO 5419 6.000E+11 0.00 11000.0

!pentanone+h=h2+mvk+ch3  
! FCO 5414 2.700E+07 2.00 5000.0  
!pentanone+oh=h2o+mvk+ch3  
! FCO 5415 7.800E+06 2.00 -765.0  
!pentanone+ho2=h2o2+mvk+ch3  
! FCO 5416 1.200E+12 0.00 15500.0  
!pentanone+ch3=ch4+mvk+ch3  
! FCO 5417 6.000E+11 0.00 9600.0  
!pentanone+ch3o2=ch3o2h+mvk+ch3  
! FCO 5418 6.000E+11 0.00 9600.0  
!pentanone+c2h5=c2h6+mvk+ch3  
! FCO 5419 6.000E+11 0.00 11000.0

!nc3h7coch2=nc3h7+ch2co  
! rev / 1.226E+18 -1.40 43450.0 /  
! 1.000E+11 0.00 11600.0 /

!c3h6coc3-1=c2h4+ch2coc3  
Curran 2.904E+16 -1.21 27000.0 !  
! rev / 1.000E+11 0.00 8600.0 /

!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\* c2h5coc2h4 \*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*

!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\* Ethylvinylketone c2h5coc2h3 \*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*

c2h5coc2h3=>c2h3+c2h5co 7.940E+17 0.00 84456.0  
! idem acetone mousavipour1996  
c2h5coc2h3=>c2h3co+c2h5 7.940E+17 0.00 84456.0  
! idem acetone mousavipour1996

!c2h5coc2h3+ho2=c2h3coc2h4+h2o2 1.100E+11 0.00 17061.0  
! idem c4h8  
!c2h5coc2h3+oh=c2h3coc2h4+h2o 4.186E+06 2.00 -543.0  
! idem c4h8  
!c2h5coc2h3+o=c2h3coc2h4+oh 2.600E+12 0.00 4500.0  
! idem c4h8

!c2h5coc2h3+h=c2h3coc2h4+h2  
! idem c4h8 1.950E+13 0.00 4445.0  
!c2h5coc2h3+ch3=c2h3coc2h4+ch4  
! idem c4h8 1.000E+11 0.00 17061.0

c2h5coc2h3+oh=c2h5coc2h2+ch2o  
Curran 1.000E+10 0.00 0.0 !  
! rev / 1.673E+11 -0.39 18220.0 /  
c2h5coc2h3+ho2=c2h5coc2h2+ho2+oh  
Curran 6.030E+09 0.00 7949.0 !  
! rev / 1.000E+00 0.00 0.0 /  
c2h5coc2h3+ch3o2=c2h5coc2h2+ch3o  
Curran 3.970E+11 0.00 17050.0 !  
! rev / 1.000E+00 0.00 0.0 /

!c2h5coc2h3+oh=pc2h4coc2h3+h2o  
Curran 7.550E+09 0.97 1586.0 !  
! rev / 1.285E+08 2.53 20210.0 /  
c2h5coc2h3+ho2=pc2h4coc2h3+h2o2  
Curran 2.380E+04 2.55 16490.0 !  
! rev / 2.405E+03 3.78 3652.0 /  
c2h5coc2h3+ch3o2=pc2h4coc2h3+ch3o2h  
Curran 3.010E+12 0.00 19380.0 !  
! rev / 1.250E+12 1.06 5822.0 /  
c2h5coc2h3+o2=pc2h4coc2h3+ho2  
Curran 2.050E+13 0.00 51310.0 !  
! rev / 9.160E+06 2.00 7700.0 !  
c2h5coc2h3+h=pc2h4coc2h3+h2  
Curran 9.160E+06 2.00 7700.0 !  
! rev / 5.000E+11 0.00 10400.0 !  
c2h5coc2h3+c2h3=pc2h4coc2h3+c2h4  
Curran 5.000E+11 0.00 10400.0 !  
! rev / 5.000E+10 0.00 13400.0 !  
c2h5coc2h3+c2h5=pc2h4coc2h3+c2h6  
Curran 5.000E+10 0.00 13400.0 !  
! rev / 2.170E+11 0.00 6460.0 !  
c2h5coc2h3+ch3o=pc2h4coc2h3+ch3oh  
Curran 2.170E+11 0.00 6460.0 !  
! rev / 8.450E+11 0.00 -228.0 !  
c2h5coc2h3+oh=sc2h4coc2h3+h2o  
Curran 8.450E+11 0.00 -228.0 !  
! rev / 1.350E+13 -0.20 28600.0 /  
c2h5coc2h3+ho2=sc2h4coc2h3+h2o2  
Curran 2.000E+11 0.00 8698.0 !  
! rev / 1.896E+13 -0.53 6065.0 /  
c2h5coc2h3+ch3o2=sc2h4coc2h3+ch3o2h  
Curran 2.000E+12 0.00 15250.0 !  
! rev / 7.793E+14 -0.71 11900.0 /  
c2h5coc2h3+o2=sc2h4coc2h3+ho2  
Curran 1.550E+13 0.00 41970.0 !  
! rev / 4.480E+06 2.00 3200.0 !  
c2h5coc2h3+h=sc2h4coc2h3+h2  
Curran 4.480E+06 2.00 3200.0 !  
! rev / 3.000E+11 0.00 5600.0 !  
c2h5coc2h3+c2h3=sc2h4coc2h3+c2h4  
Curran 3.000E+11 0.00 5600.0 !  
! rev / 3.000E+10 0.00 8600.0 !  
c2h5coc2h3+c2h5=sc2h4coc2h3+c2h6  
Curran 3.000E+10 0.00 8600.0 !  
! rev / 1.450E+11 0.00 2771.0 !  
c2h5coc2h3+ch3o=sc2h4coc2h3+ch3oh  
Curran 1.450E+11 0.00 2771.0 !  
! rev / 5.263E+14 0.38 21460.0 !  
pc2h4coc2h3=c2h3co+c2h4  
Curran 5.263E+14 0.38 21460.0 !  
! rev / 8.000E+10 0.00 11300.0 /  
sc2h4coc2h3=ch3chco+c2h3  
Curran 1.637E+16 -0.74 54590.0 !  
! rev / 8.000E+10 0.00 12600.0 /

!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\* Pent-1-en-1-yl radical Ac5h9-1 \*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*

!\*\*\*\* c2h3coc2h4 radical \*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*

!pc2h4coc2h3=c2h3co+c2h4 5.263E+14 0.38 21460.0  
! Curran  
!pc2h4coc2h3+oh=divinket+h2o 4.000E+13 0.00 0.0 !  
! idem c4h7+oh Yahyaoui  
!pc2h4coc2h3+h=divinket+h2 3.160E+13 0.00 0.0 !  
! idem c4h7+h Yahyaoui  
!pc2h4coc2h3+ho2=divinket+h2o2 1.800E+12 0.00 0.0 !  
! idem c4h7+ho2 Yahyaoui  
!pc2h4coc2h3+ch3=divinket+ch4 7.940E+12 0.00 0.0 !  
! idem c4h731+ch3 Yahyaoui  
!pc2h4coc2h3+o2=divinket+ho2 1.020E+12 0.00 22654.0 !  
! idem c4h73+o2 Yahyaoui  
!pc2h4coc2h3=divinket+h 1.000E+14 0.00 44000.0 !  
! idem c4h73=c4h6+h Yahyaoui

!pc2h4coc2h3+o=c2h3co+ch3hco 2.000E+14 0.00 0.0 !  
! idem c5h7  
!pc2h4coc2h3+ho2=c2h3co+ch3hco+oh 1.000E+13 0.00 0.0 !  
! idem phnc2

!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\* Divinylketone DIVINKET \*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*

c2h3+c2h3co=divinket 3.120E+14 -0.50 0.0 !  
! idem c2h5+ch3co=butanone Tsang-hampson

!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\* Pent-2-en-4-yl radical Dc5h9-2 \*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*

Dc5h9-2+h=c2c5h10 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(RT)  
Dc5h9-2+h=t2c5h10 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(RT)  
Dc5h9-2=c5h8-13+h 1.200E+14 0.00 49300.0 !  
(Cc4h7-1)  
Dc5h9-2+o2=c5h8-13+ho2 1.000E+11 0.00 0.0 !  
(EST/Cc4h7-1+o2)  
!Dc5h9-2+o2=>ch3co+tc3h5+oh 3.970E+12 0.00 -250.0 !  
(ESTc2h3+o2)  
Dc5h9-2+ho2=>ch3hco+sc3h5+oh 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(EST/RAD+ho2)  
Dc5h9-2+h=c5h8-13+h2 3.160E+12 0.00 0.0 !  
(EST Cc4h7-1+h)  
Dc5h9-2+ch3=c5h8-13+ch4 1.000E+13 0.00 0.0 !  
(ESTIMEE)  
Dc5h9-2+c2h3=c5h8-13+c2h4 4.000E+12 0.00 0.0 !  
(ESTIMEE)  
Dc5h9-2+c2h5=c5h8-13+c2h6 4.000E+12 0.00 0.0 !  
(ESTIMEE)  
Dc5h9-2+ac3h5=c5h8-13+c3h6 4.000E+12 0.00 0.0 !  
(ESTIMEE)  
Dc5h9-2+Cc4h7-1=c5h8-13+c4h8 3.160E+12 0.00 0.0 !  
(ESTIMEE)

!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\* Pent-1-en-1-yl radical Ac5h9-1 \*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*

Ac5h9-1=cyc5h8+h (16/09/2000 idem cyc6h10 DV) 2.280E+11 0.00 18277.0 !  
Ac5h9-1+ho2=>nc3h7+ch2co+oh (06/09/2000) 5.000E+12 0.00 8000.0 !  
IEc5h9-1=cyc5h8+h (16/09/2000 idem cyc6h10 DV) 2.280E+11 0.00 18277.0 !  
Ec5h9-1=cyc5h8+h Tsang 1992 6.900E-03 0.00 -4213.0 !  
!\*\*\*\*\* 3-Butenyl, 2-methylene- radical isoph \*\*\*\*  
isoph=isope+h idem Dc4h7-1 1.000E+14 0.00 44000.0 !  
isoph=c2h4+tc3h5 idem Dc4h7-1 5.000E+13 0.00 38000.0 !  
!\*\*\*\*\* 3-Butenyl, 2-methylene- radical isope \*\*\*\*  
isope+ho2=isopy+h2o2 (=c3h6/190995) 2.000E+05 2.60 13910.0 !  
isope+oh=isopy+h2o (=c4h6) 2.000E+07 2.00 5000.0 !  
!\*\*\*\*\* 3-Butenyl, 2-methylene- radical isopy \*\*\*\*  
c4h4+ch3=isopy (ESTIMEE) 2.500E+13 0.00 0.0 !  
isopy=c2h3+ac3h4 Dean 2.000E+13 0.00 48700.0 !  
isopy+o2=ch2o+ch2coc2h3 Lee 3.080E+09 0.37 16910.0 !  
!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\*\* SOUS-mECANISM E C6  
!\*\*\*\*\*  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! hexane c6h14 reactions  
! global step : metathesis + direct decomposition  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
!c6h14=nc3h7+nc3h7 1.000E+17 0.00 86930.0 !  
!c6h14=c2h5+pc4h9 1.000E+17 0.00 84750.0 !  
!c6h14=ch3+Ac5h11 1.000E+17 0.00 87430.0 !

!c6h14=h+Ac6h13 1.800E+16 0.00 98000.0 !  
!c6h14=h+Bc6h13 1.200E+16 0.00 98730.0 !  
!c6h14=h+Cc6h13 1.200E+16 0.00 98530.0 !  
c6h14=nc3h7+nc3h7 7.360E+28 -3.04 93270.0 !  
estimated from reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009  
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199  
c6h14=c2h5+pc4h9 2.750E+29 -3.284 92039.0 !  
estimated from reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009  
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199  
c6h14=ch3+Ac5h11 3.830E+24 -1.906 93137.0 !  
estimated from reverse constant krev=1E+13, Westbrook et al 2009  
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199  
c6h14=h+Ac6h13 7.930E+18 -0.373 104311.0 !  
estimated from reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009  
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199  
c6h14=h+Bc6h13 1.140E+19 -0.431 102069.0 !  
estimated from reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009  
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199  
c6h14=h+Cc6h13 1.370E+19 -0.449 102119.0 !  
estimated from reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009  
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199  
c6h14+o2=ho2+Ac6h13 4.000E+13 0.000 50870.0 !  
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
c6h14+o2=ho2+Bc6h13 8.000E+13 0.000 47690.0 !  
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
c6h14+o2=ho2+Cc6h13 8.000E+13 0.000 47690.0 !  
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
c6h14+oh=h2o+Ac6h13 1.410E+07 1.80 973.7 !  
mati  
c6h14+oh=h2o+Bc6h13 1.990E+06 2.00 -596.2 !  
mati  
c6h14+oh=h2o+Cc6h13 2.250E+06 2.00 -1391.0 !  
mati  
c6h14+ho2=h2o+Ac6h13 3.600E+04 2.50 16683.0 !  
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365  
c6h14+ho2=h2o+Bc6h13 4.000E+04 2.50 14208.0 !  
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365  
c6h14+ho2=h2o+Cc6h13 4.000E+04 2.50 14208.0 !  
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365  
c6h14+h=h2+Ac6h13 5.700E+07 2.00 7700.0 !  
mE 2942 CW  
c6h14+h=h2+Bc6h13 1.800E+07 2.00 5000.0 !  
mE 2943 CW  
c6h14+h=h2+Cc6h13 1.800E+07 2.00 5000.0 !  
mE 2944 CW  
o+c6h14+oh+Ac6h13 1.000E+14 0.00 7850.0 !  
mE 2937 CW  
o+c6h14+oh+Bc6h13 5.200E+13 0.00 5200.0 !  
mE 2938 CW  
o+c6h14+oh+Cc6h13 5.200E+13 0.00 5200.0 !  
mE 2939 CW

c6h14+ch3=ch4+Ac6h13 6.000E-01 4.00 8200.0 !  
mE 2957 CN  
c6h14+ch3=ch4+Bc6h13 4.000E+11 0.00 9600.0 !  
mE 2958 CN  
c6h14+ch3=ch4+Cc6h13 4.000E+11 0.00 9600.0 !  
mE 2959 CN  
c6h14+c2h5=c2h6+Ac6h13 6.000E+11 0.00 13500.0 !  
mE 2992 CR  
c6h14+c2h5=c2h6+Bc6h13 4.000E+11 0.00 11000.0 !  
mE 2993 CN  
c6h14+c2h5=c2h6+Cc6h13 4.000E+11 0.00 11000.0 !  
mE 2994 CN  
c6h14+hco=ch2o+Ac6h13 2.000E+05 2.50 18500.0 !  
mE 2962 CN  
c6h14+hco=ch2o+Bc6h13 2.200E+07 1.90 17000.0 !  
mE 2963 CN  
c6h14+hco=ch2o+Cc6h13 2.200E+07 1.90 17000.0 !  
mE 2964 CN  
c6h14+ch3o=ch3oh+Ac6h13 3.200E+11 0.00 7300.0 !  
mE 2972 CN  
c6h14+ch3o=ch3oh+Bc6h13 2.900E+11 0.00 4500.0 !  
mE 2973 CN  
c6h14+ch3o=ch3oh+Cc6h13 2.900E+11 0.00 4500.0 !  
mE 2974 CN  
c6h14+ch2oh=ch3oh+Ac6h13 2.000E+02 2.95 14000.0 !  
mE 2967 CN  
c6h14+ch2oh=ch3oh+Bc6h13 1.200E+02 2.95 12000.0 !  
mE 2968 CN  
c6h14+ch2oh=ch3oh+Cc6h13 1.200E+02 2.95 12000.0 !  
mE 2969 CN  
c6h14+ch3o2=ch3o2h+Ac6h13 1.200E+13 0.00 20000.0 !  
mE 2977 CN  
c6h14+ch3o2=ch3o2h+Bc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
mE 2978 CN  
c6h14+ch3o2=ch3o2h+Cc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
mE 2979 CN  
c6h14+ch2hco=ch3hco+Ac6h13 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
mE 3002 CR  
c6h14+ch2hco=ch3hco+Bc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3003 CR  
c6h14+ch2hco=ch3hco+Cc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3004 CR  
c6h14+ch3co=ch3hco+Ac6h13 3.000E+11 0.00 15000.0 !  
mE 3007 CR  
c6h14+ch3co=ch3hco+Bc6h13 2.000E+11 0.00 12700.0 !  
mE 3008 CR  
c6h14+ch3co=ch3hco+Cc6h13 2.000E+11 0.00 12700.0 !  
mE 3009 CR  
c6h14+nc3h7=c3h8+Ac6h13 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
mE 3032 CR  
c6h14+nc3h7=c3h8+Bc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3033 CR  
c6h14+nc3h7=c3h8+Cc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3034 CR

c6h14+pc4h9=c4h10+Ac6h13 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
mE 3037 CR  
c6h14+pc4h9=c4h10+Bc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3038 CR  
c6h14+pc4h9=c4h10+Cc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3039 CR  
c6h14+Ac5h11=nc5h12+Ac6h13 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
mE 3042 CR  
c6h14+Ac5h11=nc5h12+Bc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3043 CR  
c6h14+Ac5h11=nc5h12+Cc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3044 CR  
c6h14+Ac6h13=c6h14+Bc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3067 CR  
c6h14+Ac6h13=c6h14+Cc6h13 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
mE 3068 CR  
c6h14+Bc6h13=c6h14+Cc6h13 4.000E+11 0.00 12400.0 !  
mE 3072 CR  
c6h14+o2cho=Ac6h13+ho2cho 1.680E+13 0.00 20440.0 !  
Curran et al c7 mechanism release may 2004  
c6h14+o2cho=Bc6h13+ho2cho 1.120E+13 0.00 17690.0 !  
Curran et al c7 mechanism release may 2004  
c6h14+o2cho=Cc6h13+ho2cho 1.120E+13 0.00 17690.0 !  
Curran et al c7 mechanism release may 2004  
!c6h14+c6h13qjA=c6h13qA+Ac6h13 1.200E+13 0.00 20000.0 !  
! mE 3182 CN  
!c6h14+c6h13qjA=c6h13qA+Bc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
! mE 3183 CN  
!c6h14+c6h13qjA=c6h13qA+Cc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
! mE 3184 CN  
!c6h14+c6h13qjB=c6h13qB+Ac6h13 1.200E+13 0.00 20000.0 !  
! mE 3187 CN  
!c6h14+c6h13qjB=c6h13qB+Bc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
! mE 3188 CN  
!c6h14+c6h13qjB=c6h13qB+Cc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
! mE 3189 CN  
!c6h14+c6h13qjC=c6h13qC+Ac6h13 1.200E+13 0.00 20000.0 !  
! mE 3192 CN  
!c6h14+c6h13qjC=c6h13qC+Bc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
! mE 3193 CN  
!c6h14+c6h13qjC=c6h13qC+Cc6h13 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
! mE 3194 CN  
!\*\*\*\*\*  
! c6h13 REACTIONS  
!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*  
! 1) C-C bond scission  
! 2) C-h bond scission : alkene formation  
! 3) oxydation reactions  
! 4) isomerisation  
! 5) O2 addition  
!\*\*\*\*\*  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! 1) C-C bond scission  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 Ac6h13=pc4h9+c2h4 1.020E+12 0.30 27276.0 !  
 Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148  
 Bc6h13=nc3h7+c3h6 4.470E+11 0.57 28047.0 !  
 Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148  
 Cc6h13=c2h5+c4h8 3.550E+12 0.29 28246.0 !  
 Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148  
 Cc6h13=ch3+c5h10 8.130E+10 0.78 29651.0 !  
 Tsang et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148  
 !Ac6h13=pc4h9+c2h4 2.000E+13 0.00 28700.0 !  
 ! DE 1699 CW  
 !Bc6h13=nc3h7+c3h6 2.000E+13 0.00 28700.0 !  
 ! DE 1731 CW  
 !Cc6h13=c2h5+c4h8 2.000E+13 0.00 28700.0 !  
 ! DE 1727 CW  
 !Cc6h13=ch3+c5h10 2.000E+13 0.00 31000.0 !  
 ! DE 1728 CN  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 2) C-h bond scission  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! estimated from reverse constant  $k=2.5E+11.T^{0.51}.exp(-2620/RT)$   
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 !Ac6h13=h+c6h12-1 3.000E+13 0.00 38000.0 ! DE 1700 CN  
 !Bc6h13=h+c6h12-2 3.000E+13 0.00 38000.0 ! DE 1732 CN  
 !Bc6h13=h+c6h12-1 3.000E+13 0.00 39000.0 ! DE 1733 CN  
 !Cc6h13=h+c6h12-2 3.000E+13 0.00 38000.0 ! DE 1729 CN  
 !Cc6h13=h+c6h12-3 3.000E+13 0.00 38000.0 ! DE 1730 CN

Ac6h13=h+c6h12-1 1.390E+16 -0.88 36837.0 !  
 estimated from reverse constant  $k=2.5E+11.T^{0.51}.exp(-2620/RT)$   
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Bc6h13=h+c6h12-1 1.630E+16 -0.82 37690.0 !  
 estimated from reverse constant  $k=4.24E+11.T^{0.51}.exp(-1230/RT)$   
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Bc6h13=h+c6h12-2 8.760E+15 -1.19 37213.0 !  
 estimated from reverse constant  $k=2.5E+11.T^{0.51}.exp(-2620/RT)$   
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Cc6h13=h+c6h12-2 7.330E+15 -1.17 37163.0 !  
 estimated from reverse constant  $k=2.5E+11.T^{0.51}.exp(-2620/RT)$   
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Cc6h13=h+c6h12-3 7.330E+15 -1.17 37163.0 !  
 estimated from reverse constant  $k=2.5E+11.T^{0.51}.exp(-2620/RT)$   
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 3) oxydation reactions  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 Ac6h13+o2=c6h12-1+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX 2572 CN  
 !Bc6h13+o2=c6h12-1+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX 2589 CN  
 !Bc6h13+o2=c6h12-2+ho2 8.100E+11 0.00 5000.0 ! OX 2590 CN  
 !Cc6h13+o2=c6h12-2+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX 2587 CN  
 !Cc6h13+o2=c6h12-3+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX 2588 CN  
 Bc6h13+o2=c6h12-1+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988  
 Bc6h13+o2=c6h12-2+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988

Cc6h13+o2=c6h12-2+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988  
 Cc6h13+o2=c6h12-3+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 4) isomerisation  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 !Ac6h13=Bc6h13 7.900E+10 0.00 12000.0 !  
 ! estimation selon Exgas  
 !Ac6h13=Cc6h13 4.600E+11 0.00 17300.0 !  
 ! estimation selon Exgas  
 Ac6h13=Bc6h13 9.886E+07 1.00 12000.0 !  
 rev / 1.483E+08 1.00 14500.0/  
 Ac6h13=Cc6h13 3.346E+09 1.00 37000.0 !  
 ! rev / 5.019E+08 1.00 39500.0/  
 DUPLICATE  
 Ac6h13=Cc6h13 5.750E+08 1.00 17300.0 !  
 ! rev / 8.625E+08 1.00 19800.0/  
 DUPLICATE  
 Bc6h13=Cc6h13 3.346E+09 1.00 37000.0 !  
 ! rev / 3.346E+09 1.00 37000.0/  
 !Ac6h13=Bc6h13 1.820E+02 2.55 10961.0 ! Tsang  
 et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148  
 ! rev / 1.700E+01 2.89 13380.0/  
 !Ac6h13=Cc6h13 6.920E+00 3.20 16559.0 ! Tsang  
 et al. 2007 31st Symp. Int. Comb. pp. 141-148  
 ! rev / 7.080E+00 3.23 18938.0/  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 5) O2 addition  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac6h13+o2=c6h13qjA 4.820E+36 -8.23 5167.0 !  
 !DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2  
 !Bc6h13+o2=c6h13qjB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 !DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !Cc6h13+o2=c6h13qjC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 !DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !Ac6h13+o2=c6h13qjA 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
 !Bc6h13+o2=c6h13qjB 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
 !Cc6h13+o2=c6h13qjC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 5) decomposition by O, O2 and ho2  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac6h13+o2=c6h13oJA+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Bc6h13+o2=c6h13oJB+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Cc6h13+o2=c6h13oJC+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Ac6h13+ch3o2=c6h13oJA+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !

Curran  
 Bc6h13+ch3o2=c6h13oJB+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Cc6h13+ch3o2=c6h13oJC+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Ac6h13+c2h5o2=c6h13oJA+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Bc6h13+c2h5o2=c6h13oJB+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Cc6h13+c2h5o2=c6h13oJC+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Ac6h13+nc3h7o2=c6h13oJA+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Bc6h13+nc3h7o2=c6h13oJB+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Cc6h13+nc3h7o2=c6h13oJC+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Ac6h13+c6h13qjA=c6h13oJA+c6h13oJA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Ac6h13+c6h13qjB=c6h13oJA+c6h13oJB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Ac6h13+c6h13qjC=c6h13oJA+c6h13oJC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Bc6h13+c6h13qjA=c6h13oJB+c6h13oJA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Bc6h13+c6h13qjB=c6h13oJB+c6h13oJB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Bc6h13+c6h13qjC=c6h13oJB+c6h13oJC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Cc6h13+c6h13qjA=c6h13oJC+c6h13oJA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Cc6h13+c6h13qjB=c6h13oJC+c6h13oJB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran  
 Cc6h13+c6h13qjC=c6h13oJC+c6h13oJC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran

#####  
 ! c6h13qj REACTIONS  
 !#####  
 !\*\*\*\*\*  
 ! 1) isomerisation to QOOH  
 ! 2) dismutations with ho2  
 ! ROOH formation  
 !\*\*\*\*\*  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 1) isomerisation to QOOH  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 c6h13qjA=c6h12rBqA 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
 5-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjA=c6h12rCqA 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
 6-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjA=c6h12rDqA 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
 7-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjA=c6h12rEqA 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
 8-member ring, 2 secondary H atoms

c6h13qjB=c6h12rAqB 5.030E+09 1.00 35500.0 !  
 5-member ring, 3 primary H atoms  
 c6h13qjB=c6h12rCqB 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
 5-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjB=c6h12rDqB 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
 6-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjB=c6h12rEqB 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
 7-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjB=c6h12rFqB 2.550E+07 1.00 24000.0 !  
 8-member ring, 3 primary H atoms  
 c6h13qjC=c6h12rAqC 8.630E+08 1.00 28000.0 !  
 6-member ring, 3 primary H atoms  
 c6h13qjC=c6h12rBqC 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
 5-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjC=c6h12rDqC 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
 5-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjC=c6h12rEqC 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
 6-member ring, 2 secondary H atoms  
 c6h13qjC=c6h12rFqC 1.480E+08 1.00 25000.0 !  
 7-member ring, 3 primary H atoms  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 2) dismutations with ho2  
 ! ROOH formation  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 c6h13qjA+ho2=c6h13oJA+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
 idem ch3o2 Raventos-Duran  
 c6h13qjB+ho2=c6h13oJB+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
 idem ch3o2 Raventos-Duran  
 c6h13qjC+ho2=c6h13oJC+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
 idem ch3o2 Raventos-Duran  
 c6h13qjA+ho2=c6h13oJA+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjB+ho2=c6h13oJB+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjC+ho2=c6h13oJC+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjA+ch3o2=c6h13oJA+ch3o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjB+ch3o2=c6h13oJB+ch3o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjC+ch3o2=c6h13oJC+ch3o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjA+c2h5o2=c6h13oJA+c2h5o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjB+c2h5o2=c6h13oJB+c2h5o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjC+c2h5o2=c6h13oJC+c2h5o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjA+nc3h7o2=c6h13oJA+nc3h7o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjB+nc3h7o2=c6h13oJB+nc3h7o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjC+nc3h7o2=c6h13oJC+nc3h7o+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
 c6h13qjA+c6h13qjA=c6h13oJA+c6h13oJA+o2 1.000E+11 0.00  
 0.0  
 c6h13qjA+c6h13qjB=c6h13oJA+c6h13oJB+o2 1.000E+11 0.00  
 0.0  
 c6h13qjB+c6h13qjB=c6h13oJB+c6h13oJB+o2 1.000E+11 0.00  
 0.0  
 c6h13qjB+c6h13qjC=c6h13oJB+c6h13oJC+o2 1.000E+11 0.00  
 0.0  
 c6h13qjC+c6h13qjC=c6h13oJC+c6h13oJC+o2 1.000E+11 0.00  
 0.0

#####  
! c6h12rXqjY REACTIONS  
#####

- ! 1) isomerisation
- ! 2) addition to o2
- ! 3) c-o and c-c breaking
- ! 4) o-o breaking
- ! 5) o-rings formation
- ! 6) c-o breaking
- ! 7) c-c breaking
- ! 8) c-h breaking
- ! 9) oxidation

!c6h12rDqA=c4h8+c2h4o2h	2.000E+13	0.00	28700.0 !
!c6h12rEqA=c3h6+c3h6oohl-3	2.000E+13	0.00	28700.0 !
!c6h12rEqB=c3h6+c3h6oohl-2-1	2.000E+13	0.00	28700.0 !
!c6h12rFqB=c2h4+c4h8rDqB	2.000E+13	0.00	28700.0 !
!c6h12rFqC=c2h4+c4h8rAgB	2.000E+13	0.00	28700.0 !
!!!!!!			
! 1) isomerisation			
! c6h12rYqX=c6h12rZqX			
!!!!!!			
!c6h12rEqA=c6h12rEqA	5.700E+08	1.00	17300.0 !
IS 317 KB			
!c6h12rEqA=c6h12rFqA	1.500E+08	1.00	14500.0 !
IS 318 KB			
!c6h12rEqA=c6h12rFqA	8.600E+08	1.00	19800.0 !
IS 319 KB			
!c6h12rDqA=c6h12rAgA	5.700E+08	1.00	15300.0 !
IS 320 KB			
!c6h12rEqA=c6h12rAgA	9.900E+07	1.00	10000.0 !
IS 321 KB			
!c6h12rFqA=c6h12rAgA	1.700E+07	1.00	15400.0 !
IS 516 KB			
!c6h12rAgB=c6h12rDqB	5.700E+08	1.00	17300.0 !
IS 523 KB			
!c6h12rAgB=c6h12rEqB	9.900E+07	1.00	12000.0 !
IS 524 KB			
!c6h12rAgB=c6h12rFqB	2.500E+07	1.00	19900.0 !
IS 525 KB			
!c6h12rCqB=c6h12rFqB	8.600E+08	1.00	19800.0 !
IS 526 KB			
!c6h12rEqB=c6h12rBqB	2.900E+08	1.00	13300.0 !
IS 527 KB			
!c6h12rFqB=c6h12rBqB	4.900E+07	1.00	8000.0 !
IS 528 KB			
!c6h12rEqC=>c6h12rEqC	5.700E+08	1.00	17300.0 !
IS 517 KB			
!c6h12rEqC=c6h12rFqC	1.500E+08	1.00	14500.0 !
IS 518 KB			
!c6h12rEqC=c6h12rDqC	5.700E+08	1.00	17300.0 !

IS 519 KB			
!c6h12rAgC=c6h12rEqC	9.900E+07	1.00	12000.0 !
IS 520 KB			
!c6h12rAgC=>c6h12rFqC	2.500E+07	1.00	19900.0 !
IS 521 KB			
!c6h12rFqC=c6h12rCqC	2.900E+08	1.00	13300.0 !
IS 522 KB			
!c6h12rEqC=>c6h12rBqC	5.700E+08	1.00	17300.0 !
IS 517 KB			
!c6h12rFqC=>c6h12rAgC	2.500E+07	1.00	19900.0 !
IS 521 KB			

!!!!!!			
! 2) addition to c2			
! c6h12rYqX+o2=c6h12qjYqX			
!!!!!!			
!!c6h12rAgA+o2=c6h12qjAgA	1.840E+45	-11.10	6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rFqA+o2=c6h12qjFqA	4.820E+36	-8.23	5167.0
!DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2			
!c6h12rAgB+o2=c6h12qjAgB	4.820E+36	-8.23	5167.0 !
!DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2			
!!c6h12rBqB+o2=c6h12qjBqB	1.840E+45	-11.10	6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB	4.820E+36	-8.23	5167.0 !
!DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2			
!c6h12rAgC+o2=c6h12qjAgC	4.820E+36	-8.23	5167.0 !
!DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2			
!c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!!c6h12rCqC+o2=c6h12qjCqC	1.840E+45	-11.10	6538.0
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC	1.840E+45	-11.10	6538.0 !
!DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2			
!c6h12rFqC+o2=c6h12qjFqC	4.820E+36	-8.23	5167.0 !
!DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2			
c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA	1.700E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)			
c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA	1.800E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)			
c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA	1.800E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)			
c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA	1.700E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)			

c6h12rAgB+o2=c6h12qjAgB	9.000E+18	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)			
c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB	1.800E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)			
c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB	1.800E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)			
c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB	1.700E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)			
c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB	9.000E+18	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)			
c6h12rAgC+o2=c6h12qjAgC	9.000E+18	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)			
c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC	1.700E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)			
c6h12rCqC+o2=c6h12qjCqC	1.800E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)			
c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC	1.700E+19	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)			
c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC	9.000E+18	-2.50	0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)			

- !!!!!!
- ! 3) o-o and c-c breaking
- !!!!!!

c6h12rAgC=>oh+c2h4+nc3h7hco	5.000E+13	0.00	25500.0 !
c6h12rCqA=>oh+c2h4+nc3h7hco	5.000E+13	0.00	25500.0 !
c6h12rDqB=>oh+c2h4+nc3h7hco	5.000E+13	0.00	25500.0 !
c6h12rEqC=>oh+c2h4+nc3h7hco	5.000E+13	0.00	25500.0 !

- !!!!!!
- ! 5) o-rings formation
- ! (o-o breaking)
- !!!!!!

!c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB	1.400E+12	0.00	15900.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC	2.040E+11	0.00	19500.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD	3.600E+10	0.00	13050.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE	1.500E+08	0.00	1800.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rAgB=oh+c6h12o-AB	1.400E+12	0.00	15900.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rBqB=oh+c6h12o-BC	1.400E+12	0.00	15900.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC	2.040E+11	0.00	19500.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rDqB=oh+c6h12o-BD	3.600E+10	0.00	13050.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE	1.500E+08	0.00	1800.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rFqB=oh+c6h12o-AE	1.400E+12	0.00	15900.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rAgC=oh+c6h12o-AC	2.040E+11	0.00	19500.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rBqC=oh+c6h12o-BC	1.400E+12	0.00	15900.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rCqC=oh+c6h12o-CD	2.040E+11	0.00	19500.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rDqC=oh+c6h12o-BD	2.040E+11	0.00	19500.0 !
Wijaya 2003			

!c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD	3.600E+10	0.00	13050.0 !
Wijaya 2003			
!c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			
!c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC	2.500E+10	0.00	15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 3			
!c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD	2.100E+08	0.00	6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol			
!c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE	1.500E+08	0.00	1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 8			
!c6h12rBqB=oh+c6h12o-AB	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			
!c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			
!c6h12rDqB=oh+c6h12o-BD	2.500E+10	0.00	15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 3			
!c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE	2.100E+08	0.00	6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol			
!c6h12rFqB=oh+c6h12o-AE	1.500E+08	0.00	1800.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 8			
!c6h12rBqC=oh+c6h12o-BC	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			
!c6h12rAgC=oh+c6h12o-AC	2.500E+10	0.00	15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 3			
!c6h12rDqC=oh+c6h12o-CD	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			
!c6h12rEqC=oh+c6h12o-BD	2.500E+10	0.00	15250.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 3			
!c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD	2.100E+08	0.00	6500.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol			
c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			
c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC	9.100E+10	0.00	16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)			
c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD	3.600E+09	0.00	7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)			
c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE	1.700E+08	0.00	1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)			
c6h12rAgB=oh+c6h12o-AB	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			
c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC	2.950E+11	0.00	22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A			
divided by 2			





c6h12o-BC+ho2=>h2o2+mvk+c2h5 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-BC+h=>h2+ch3chco+nc3h7 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-BC+oh=>h2o+ch3chco+nc3h7 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+nc3h7 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-CD+h=>h2+ch3+c2h5coc2h3 4.800E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h5coc2h3 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h5coc2h3 2.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-AC+h=>h2+c5h10+hco 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c6h12o-AC+oh=>h2o+c5h10+hco 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c5h10+hco 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-AC+h=>h2+c2h4+c3h7co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-AC+oh=>h2o+c2h4+c3h7co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c3h7co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-BD+h=>h2+c4h8+ch3co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-BD+oh=>h2o+c4h8+ch3co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c4h8+ch3co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-BD+h=>h2+c3h6+c2h5co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-BD+oh=>h2o+c3h6+c2h5co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-AD+h=>h2+c4h8+ch2hco 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c6h12o-AD+oh=>h2o+c4h8+ch2hco 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c4h8+ch2hco 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-AD+h=>h2+c2h4+c2h5coc2h2 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-AD+oh=>h2o+c2h4+c2h5coc2h2 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coc2h2 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-BE+h=>h2+c3h6+ch2coc3 4.800E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-BE+oh=>h2o+c3h6+ch2coc3 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2coc3 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-AE+h=>h2+c3h6+ch2ch2co 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c6h12o-AE+oh=>h2o+c3h6+ch2ch2co 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2ch2co 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c6h12o-AE+h=>h2+c2h4+ch3coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c6h12o-AE+oh=>h2o+c2h4+ch3coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+ch3coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comn. & Flame vol. 129 pp.365-377

!#####  
!#####  
! c6h12-1 REACTIONS  
!#####  
!#####

! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+h=h2+ch3+c5h8-14 9.100E+06 2.00 5000.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+o=oh+ch3+c5h8-14 2.250E+03 3.30 1653.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+oh=h2o+ac3h5+c3h6 6.350E+06 2.00 -500.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+oh=h2o+ac3h5+c3h6 1.000E+06 2.00 -597.0  
! idem alkanes  
!c6h12-1+ho2=h2o2+ac3h5+c3h6 6.800E+12 0.00 17000.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+ch3=ch4+ac3h5+c3h6 6.600E+11 0.00 10120.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+h=h2+ac3h5+c3h6 9.100E+06 2.00 5000.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+o=oh+ac3h5+c3h6 2.250E+03 3.30 1653.0  
! Yahyaoui 2005  
c6h12-1+o2=ho2+Fc6h11-1 2.100E+13 0.00 51300.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+oh=h2o+Fc6h11-1 2.850E+05 2.30 236.0  
! Yahyaoui 2005  
c6h12-1+oh=h2o+Fc6h11-1 7.050E+06 1.80 974.0  
! idem alkanes  
!c6h12-1+ho2=h2o2+Fc6h11-1 5.600E+12 0.00 19400.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+ch3=ch4+Fc6h11-1 1.470E+12 0.00 11722.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+h=h2+Fc6h11-1 2.800E+07 2.00 7700.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+o=oh+Fc6h11-1 4.150E+02 3.50 3092.0  
! Yahyaoui 2005

!#####  
!#####  
! c6h12-2 REACTIONS  
!#####  
!#####

c6h12-2+o2=Cc6h11-1+ho2 1.950E+12 0.00 39000.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+ho2=Cc6h11-1+h2o2 1.500E+11 0.00 14190.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+oh=Cc6h11-1+h2o 7.698E+05 2.214 622.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+o=Cc6h11-1+oh 1.750E+11 0.70 5884.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+h=Cc6h11-1+h2 6.457E+12 0.00 4445.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+ch3=Cc6h11-1+ch4 1.600E+11 0.00 8800.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+c2h5=Cc6h11-1+c2h6 1.000E+11 0.00 9800.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+c2h3=Cc6h11-1+c2h4 2.210E+00 3.50 4682.0 !  
idem c3h6+Rr+ac3h5  
c6h12-2+ho2=h2o2+Bc6h11-3 1.000E+11 0.00 17060.0 !  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1  
c6h12-2+o=oh+Bc6h11-3 4.000E+13 0.00 4000.0 !  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1  
c6h12-2+h=h2+Bc6h11-3 6.550E+12 0.00 4445.0 !

!#####  
! 1) addition of h and ch3  
! 2) addition of Oh  
! 3) addition of O  
! 4) addition of ho2  
! 5) decomposition by R  
!#####

c6h12-1=nc3h7+ac3h5 2.500E+16 0.00 70000.0  
! Yahyaoui  
c2h3+pc4h9=c6h12-1 1.000E+13 0.00 0.0  
! Yahyaoui  
c6h12-1=c3h6+c3h6 4.000E+12 0.00 57430.0  
! Yahyaoui  
Cc6h11-1+h=c6h12-1 1.000E+13 0.00 0.0  
! Yahyaoui  
c6h12-1=De4h7-1+c2h5 1.310E+23 -1.91 87446.0 !  
estimated from reverse constant k=8E+12  
c6h12-1=Cc3h9-1+ch3 9.650E+21 -1.48 89648.0 !  
estimated from reverse constant k=1E+13  
!!!!!!  
! 2) addition of oh, o  
!!!!!!  
c6h12-1+oh=Ac5h11+ch2o 1.000E+11 0.00 -4000.0  
! Yahyaoui  
c6h12-1+o=Ac5h11+hco 1.000E+11 0.00 -1050.0  
! Yahyaoui  
!!!!!!  
! 5) metathesis  
!!!!!!  
c6h12-1+o2=Cc6h11-1+ho2 4.000E+12 0.00 40000.0  
! Yahyaoui 2005  
c6h12-1+ho2=h2o2+Cc6h11-1 6.800E+03 2.50 10115.0  
! Scott and Walker 2002  
c6h12-1+o=oh+Cc6h11-1 4.000E+13 0.00 4000.0  
! Yahyaoui  
c6h12-1+h=h2+Cc6h11-1 6.550E+12 0.00 4445.0  
! Yahyaoui  
c6h12-1+oh=h2o+Cc6h11-1 4.186E+06 2.00 -543.0  
! idem c4h8  
c6h12-1+ch3=ch4+Cc6h11-1 2.000E+11 0.00 6800.0  
! Yahyaoui  
c6h12-1+c2h3=c2h4+Cc6h11-1 2.000E+11 0.00 6800.0  
! Yahyaoui  
c6h12-1+nc3h7=c3h8+Cc6h11-1 1.000E+11 0.00 8300.0  
! Yahyaoui  
!c6h12-1+oh=h2o+ch3+c5h8-14 6.350E+06 2.00 -500.0  
! Yahyaoui 2005  
c6h12-1+oh=h2o+ch3+c5h8-14 1.125E+06 2.00 -1391.0  
! idem alkanes  
!c6h12-1+ho2=h2o2+ch3+c5h8-14 6.800E+12 0.00 17000.0  
! Yahyaoui 2005  
!c6h12-1+ch3=ch4+ch3+c5h8-14 6.600E+11 0.00 10120.0

! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1  
c6h12-2+oh=h2o+Bc6h11-3 4.186E+06 2.00 -543.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1  
c6h12-2+ch3=ch4+Bc6h11-3 2.000E+11 0.00 6800.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1  
c6h12-2+c2h3=c2h4+Bc6h11-3 2.000E+11 0.00 6800.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1  
c6h12-2+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3 2.000E+11 0.00 8300.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1  
!#####  
!#####  
! c6h12-3 REACTIONS  
!#####  
!#####  
c6h12-3+ho2=h2o2+Bc6h11-3 2.000E+11 0.00 17060.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 \*2  
c6h12-3+o=oh+Bc6h11-3 8.000E+13 0.00 4000.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 \*2  
c6h12-3+h=h2+Bc6h11-3 1.310E+13 0.00 4445.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 \*2  
c6h12-3+oh=h2o+Bc6h11-3 8.372E+06 2.00 -543.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 \*2  
c6h12-3+ch3=ch4+Bc6h11-3 4.000E+11 0.00 6800.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 \*2  
c6h12-3+c2h3=c2h4+Bc6h11-3 4.000E+11 0.00 6800.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 \*2  
c6h12-3+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3 4.000E+11 0.00 8300.0  
! idem c6h12-1+R=Rh+Cc6h11-1 \*2

!#####  
!#####  
! Radical hexenyl REACTIONS  
!#####  
!#####

Fc6h11-1=Cc6h11-1 1.000E+12 0.00 29880.0 !  
Yahyaoui  
Cc6h11-1=c2h5+c4h6 4.000E+10 0.00 38250.0 !  
Yahyaoui  
Cc6h11-1=c5h8-13+ch3 1.000E+12 0.00 50000.0 !  
Yahyaoui  
Cc6h11-1+ho2=>nc3h7+acrol+oh 1.000E+12 0.00 8000.0 !  
Yahyaoui  
Fc6h11-1=c2h4+Dc4h7-1 1.000E+12 0.00 35000.0 !  
Yahyaoui  
Fc6h11-1=cyc6h11 1.000E+08 0.86 5900.0 !  
matheu  
c2h4+Ac4h7-1=Ac6h11-3 2.000E+11 0.00 2010.0 !  
Addition of vinyl rad to terminal c of c=c  
!  
Analogy with c2h4+c2h3 from Weissman and Benson IJCK (1989), Benson  
says Ea is lower limit  
Bc6h11-3=c5h8-13+ch3 2.000E+13 0.00 42320.0 !

```

#####
! hexa-1,5-diene c6h10-15 REACTIONS
#####
ac3h5+ac3h5=c6h10-15      1.020E+13      0.00      -263.0 !
(TULLOCH 82)
C64H7-1+c2h3=c6h10-15    1.000E+12      0.00      0.0 !
(SCHARFE 85)

c6h10-15+o2=c6h9+ho2      1.000E+11      0.00      25050.0 !
(STOTHARD/WAL92)
c6h10-15+ho2=c6h9+h2o2    1.636E+11      0.00      12583.0 !
(EST/WALKER77)
c6h10-15+oh=c6h9+h2o      5.600E+12      0.00      861.0 !
(EST/WALKER77)
c6h10-15+h=c6h9+h2        1.000E+14      0.00      3900.0 !
(SCHARFE 85)
c6h10-15+ch3=c6h9+ch4     2.500E+11      0.00      8300.0 !
(SCHARFE 85)
c6h10-15+c2h5=c6h9+c2h6  1.000E+11      0.00      8300.0 !
(SCHARFE 85)
c6h10-15+c2h3=c6h9+c2h4  6.300E+12      0.00      13000.0 !
(SCHARFE 85)
c6h10-15+ac3h5=c6h9+c3h6 1.000E+12      0.00      10500.0 !
(SCHARFE 85)

#####
! hexa-1,3-diene c6h10-13 REACTIONS
#####
!c6h10-13>c4h6+c2h4      2.066E+13      0.44      38219.3
!c6h10-13>c2h4+c2h2+c2h4 2.066E+13      0.44      38219.3

c6h10-13=c2h2+c4h8       1.000E+14      0.00      75000.0 !
Yahyaoui

#####
! hexanal REACTIONS
#####
c5h11hco+h=h2+c5h11co    4.000E+13      0.00      4200.0 !
ALD 5347
c5h11hco+oh=h2o+c5h11co  4.200E+12      0.00      500.0 !
ALD 5348
c5h11hco+ho2=h2o2+c5h11co 1.000E+12      0.00      10000.0 !
ALD 5349
c5h11hco+ch3=ch4+c5h11co 2.000E+06      5.60      2500.0 !
ALD 5350
c5h11hco+c2h5=c2h6+c5h11co 1.300E+12      0.00      8500.0 !
ALD 5351

c5h11co+M=co+Ac5h11+M    8.640E+15      0.00      14400.0 !
c5h11co+ho2=>co2+oh+Ac5h11 2.000E+13      0.00      0.0 !

#####
! hexanone REACTIONS
#####

```

```

#####
!hexanone+h=>h2+ch2co+c2h5+c2h4      2.700E+07      2.00      5000.0
! FCO 5420
!hexanone+oh=>h2o+ch2co+c2h5+c2h4     7.800E+06      2.00      -765.0
! FCO 5421
!hexanone+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+c2h4   1.200E+12      0.00      15500.0
! FCO 5422
!hexanone+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+c2h4     6.000E+11      0.00      9600.0
! FCO 5423
!hexanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+c2h4 6.000E+11      0.00      9600.0
! FCO 5424
!hexanone+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+c2h4   6.000E+11      0.00      11000.0
! FCO 5425

hexanone+h=>h2+ch2co+pc4h9             2.700E+07      2.00      5000.0 !
FCO 5420
hexanone+oh=>h2o+ch2co+pc4h9           7.800E+06      2.00      -765.0 !
FCO 5421
hexanone+ho2=>h2o2+ch2co+pc4h9         1.200E+12      0.00      15500.0 !
FCO 5422
hexanone+ch3=>ch4+ch2co+pc4h9          6.000E+11      0.00      9600.0 !
FCO 5423
hexanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+pc4h9     6.000E+11      0.00      9600.0 !
FCO 5424
hexanone+c2h5=>c2h6+ch2co+pc4h9        6.000E+11      0.00      11000.0 !
FCO 5425

!*****
! Lc6h7 hexa-1,3,5-trien-1-yl radical reactions
!*****
c6h7C=Lc6h7
Weisman                               2.500E+14      0.70      41800.0 !

Lc6h7+c2h2+nc4h5                 3.160E+13      0.00      43100.0 !
Dean
Lc6h7=Lc6h6+h                      3.980E+12      0.00      36500.0 !
Dean
Lc6h7+oh=Lc6h6+h2o                2.000E+07      2.00      1000.0 !
miller idem nc4h5
Lc6h7+h=Lc6h6+h2                  2.000E+07      2.00      1000.0 !
miller idem nc4h5
Lc6h7+o2=chocho+nc4h5              1.000E+12      0.00      0.0 !
miller idem nc4h5
Lc6h7+o2=Lc6h6+ho2                 1.000E+07      2.00      10000.0 !
miller idem nc4h5

!*****
! Lc6h6 reactions
!*****
Lc6h6+o2=>acrol+hco+c2h            2.000E+08      1.50      30200.0 !

!*****
! U-c6h5 hexa-1,3-dien-5-yn-1-yl radical reactions
!*****
c6h5=U-c6h5                         3.000E+13      0.00      72896.7 !
OK
U-c6h5=c2h2+nc4h3                   3.160E+13      0.00      43100.0 !
Dean
U-c6h5=Lc6h4+h                       3.980E+12      0.00      36500.0 !

```

```

Dean
!*****
! Lc6h4 hexa-3-en-1,5-diyne reactions
!*****
Lc6h4+o2=>2hco+2c2h              2.000E+08      1.50      30200.0 !

#####
SOUS-mECANISME C7
#####
!nc7h16+h+Ac7h15          1.340E+88      -21.17      1.428E+05
!nc7h16+h+Bc7h15          6.500E+87      -21.01      1.395E+05
!nc7h16+h+Cc7h15          6.500E+87      -21.01      1.395E+05
!nc7h16+h+Dc7h15          3.250E+87      -21.01      1.395E+05

!nc7h16+Ac6h13+ch3        2.925E+73      -16.61      1.189E+05
!nc7h16+Ac5h11+c2h5       8.100E+77      -17.62      1.204E+05
!nc7h16+pc4h9+nc3h7       1.415E+78      -17.71      1.207E+05

nc7h16=nc3h7+pc4h9        1.220E+27      -3.00      89757.5 !
estimated from reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=c2h5+Ac5h11        4.490E+25      -2.58      88135.0 !
estimated from reverse constant krev=8E+12, Westbrook et al 2009
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=ch3+Ac6h13         5.270E+22      -1.79      89834.0 !
estimated from reverse constant krev=1E+13, Westbrook et al 2009
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199

nc7h16=h+Ac7h15           1.070E+17      -0.255      101045.0 !
estimated from reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=h+Bc7h15           1.600E+17      -0.318      98008.0 !
estimated from reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=h+Cc7h15           2.025E+17      -0.347      98866.0 !
estimated from reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199
nc7h16=h+Dc7h15           1.030E+17      -0.347      98868.0 !
estimated from reverse constant krev=1E+14, Westbrook et al 2009
Comb. Flame vol. 156 pp. 181-199

!*****
! Bimolecular initiation
!
!nc7h16+o2=ho2+c10h21
!*****

nc7h16+o2=Ac7h15+ho2      4.000E+13      0.000      50870.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc7h16+o2=Bc7h15+ho2      8.000E+13      0.000      47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-
nc7h16+o2=Cc7h15+ho2      8.000E+13      0.000      47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-

```

```

nc7h16+o2=Dc7h15+ho2      4.000E+13      0.000      47690.0 !
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! heptane nc7h16 reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

nc7h16+oh=h2o+Ac7h15       1.410E+07      1.80      973.7 !
mat1
nc7h16+oh=h2o+Bc7h15       1.990E+06      2.00      -596.2 !
mat1
nc7h16+oh=h2o+Cc7h15       2.250E+06      2.00      -1391.0 !
mat1
nc7h16+oh=h2o+Dc7h15       1.125E+06      2.00      -1391.0 !
mat1

nc7h16+ho2=h2o2+Ac7h15     3.600E+04      2.50      16683.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc7h16+ho2=h2o2+Bc7h15     4.000E+04      2.50      14208.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc7h16+ho2=h2o2+Cc7h15     4.000E+04      2.50      14208.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc7h16+ho2=h2o2+Dc7h15     2.000E+04      2.50      14208.0
! according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365

nc7h16+h=h2+Ac7h15         5.700E+07      2.00      7700.0 !
mE 2942 CW
nc7h16+h=h2+Bc7h15         1.800E+07      2.00      5000.0 !
mE 2943 CW
nc7h16+h=h2+Cc7h15         1.800E+07      2.00      5000.0 !
mE 2944 CW
nc7h16+h=h2+Dc7h15         0.900E+07      2.00      5000.0 !
mE 2945 CW

+nc7h16=oh+Ac7h15         1.000E+14      0.00      7850.0 !
mE 2937 CW
+nc7h16=oh+Bc7h15         5.200E+13      0.00      5200.0 !
mE 2938 CW
+nc7h16=oh+Cc7h15         5.200E+13      0.00      5200.0 !
mE 2939 CW
+nc7h16=oh+Dc7h15         2.600E+13      0.00      5200.0 !
mE 2940 CW

nc7h16+ch3=ch4+Ac7h15     6.000E-01      4.00      8200.0 !
mE 2957 CN
nc7h16+ch3=ch4+Bc7h15     4.000E+11      0.00      9600.0 !
mE 2958 CN
nc7h16+ch3=ch4+Cc7h15     4.000E+11      0.00      9600.0 !
mE 2959 CN
nc7h16+ch3=ch4+Dc7h15     2.000E+11      0.00      9600.0 !
mE 2960 CN

nc7h16+c2h5=c2h6+Ac7h15   6.000E+11      0.00      13500.0 !
mE 2992 CR
nc7h16+c2h5=c2h6+Bc7h15   4.000E+11      0.00      11000.0 !
mE 2993 CN
nc7h16+c2h5=c2h6+Cc7h15   4.000E+11      0.00      11000.0 !
mE 2994 CN
nc7h16+c2h5=c2h6+Dc7h15   2.000E+11      0.00      11000.0 !
mE 2995 CN

nc7h16+hco=ch2o+Ac7h15    2.000E+05      2.50      18500.0 !
mE 2962 CN

```

nc7h16+hco=ch2o+bc7h15 2.200E+07 1.90 17000.0 !  
 mE 2963 CN  
 nc7h16+hco=ch2o+cc7h15 2.200E+07 1.90 17000.0 !  
 mE 2964 CN  
 nc7h16+hco=ch2o+dc7h15 1.100E+07 1.90 17000.0 !  
 mE 2965 CN  
 nc7h16+ch3o=ch3oh+ac7h15 3.200E+11 0.00 7300.0 ! mE  
 2972 CN  
 nc7h16+ch3o=ch3oh+bc7h15 2.900E+11 0.00 4500.0 ! mE  
 2973 CN  
 nc7h16+ch3o=ch3oh+cc7h15 2.900E+11 0.00 4500.0 ! mE  
 2974 CN  
 nc7h16+ch3o=ch3oh+dc7h15 1.450E+11 0.00 4500.0 ! mE  
 2975 CN  
 nc7h16+ch2oh=ch3oh+ac7h15 2.000E+02 2.95 14000.0 !  
 mE 2967 CN  
 nc7h16+ch2oh=ch3oh+bc7h15 1.200E+02 2.95 12000.0 !  
 mE 2968 CN  
 nc7h16+ch2oh=ch3oh+cc7h15 1.200E+02 2.95 12000.0 !  
 mE 2969 CN  
 nc7h16+ch2oh=ch3oh+dc7h15 0.600E+02 2.95 12000.0 !  
 mE 2970 CN  
 nc7h16+ch3o2=ch3o2h+ac7h15 1.200E+13 0.00 20000.0 !  
 mE 2977 CN  
 nc7h16+ch3o2=ch3o2h+bc7h15 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
 mE 2978 CN  
 nc7h16+ch3o2=ch3o2h+cc7h15 6.000E+12 0.00 17500.0 !  
 mE 2979 CN  
 nc7h16+ch3o2=ch3o2h+dc7h15 3.000E+12 0.00 17500.0 !  
 mE 2980 CN  
 nc7h16+ch2hco=ch3hco+ac7h15 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
 mE 3002 CR  
 nc7h16+ch2hco=ch3hco+bc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3003 CR  
 nc7h16+ch2hco=ch3hco+cc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3004 CR  
 nc7h16+ch2hco=ch3hco+dc7h15 2.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3005 CR  
 nc7h16+ch3hco=ch3hco+ac7h15 3.000E+11 0.00 15000.0 !  
 mE 3007 CR  
 nc7h16+ch3hco=ch3hco+bc7h15 2.000E+11 0.00 12700.0 !  
 mE 3008 CR  
 nc7h16+ch3hco=ch3hco+cc7h15 2.000E+11 0.00 12700.0 !  
 mE 3009 CR  
 nc7h16+ch3hco=ch3hco+dc7h15 2.000E+11 0.00 12700.0 !  
 mE 3010 CR  
 nc7h16+nc3h7=c3h8+ac7h15 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
 mE 3032 CR  
 nc7h16+nc3h7=c3h8+bc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3033 CR  
 nc7h16+nc3h7=c3h8+cc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3034 CR  
 nc7h16+nc3h7=c3h8+dc7h15 2.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3035 CR  
 nc7h16+pc4h9=c4h10+ac7h15 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
 mE 3037 CR  
 nc7h16+pc4h9=c4h10+bc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !

mE 3038 CR  
 nc7h16+pc4h9=c4h10+cc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3039 CR  
 nc7h16+pc4h9=c4h10+dc7h15 2.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3040 CR  
 nc7h16+ac5h11=nc5h12+ac7h15 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
 mE 3042 CR  
 nc7h16+ac5h11=nc5h12+bc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3043 CR  
 nc7h16+ac5h11=nc5h12+cc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3044 CR  
 nc7h16+ac5h11=nc5h12+dc7h15 2.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3045 CR  
 nc7h16+ac6h13=c6h14+ac7h15 6.000E+11 0.00 13700.0 !  
 mE 3047 CR  
 nc7h16+ac6h13=c6h14+bc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3048 CR  
 nc7h16+ac6h13=c6h14+cc7h15 4.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3049 CR  
 nc7h16+ac6h13=c6h14+dc7h15 2.000E+11 0.00 11400.0 !  
 mE 3050 CR  
 nc7h16+ac7h15=nc7h16+bc7h15 4.000E+11 0.00 12400.0 !  
 mE 3383 CR  
 nc7h16+ac7h15=nc7h16+cc7h15 4.000E+11 0.00 12400.0 !  
 mE 3384 CR  
 nc7h16+ac7h15=nc7h16+dc7h15 2.000E+11 0.00 12400.0 !  
 mE 3385 CR  
 nc7h16+bc7h15=nc7h16+cc7h15 4.000E+11 0.00 12400.0 !  
 mE 3384 CR  
 nc7h16+bc7h15=nc7h16+dc7h15 2.000E+11 0.00 12400.0 !  
 mE 3385 CR  
 nc7h16+cc7h15=nc7h16+dc7h15 2.000E+11 0.00 12400.0 !  
 mE 3385 CR  
 rev / 2.000E+11 0.00 12400.0 /  
 nc7h16+o2cho=ac7h15+ho2cho 1.680E+13 0.00 20440.0 !  
 Curran et al c7 mechanism release may 2004  
 nc7h16+o2cho=bc7h15+ho2cho 1.120E+13 0.00 17690.0 !  
 Curran et al c7 mechanism release may 2004  
 nc7h16+o2cho=cc7h15+ho2cho 1.120E+13 0.00 17690.0 !  
 Curran et al c7 mechanism release may 2004  
 nc7h16+o2cho=dc7h15+ho2cho 5.600E+12 0.00 17690.0 !  
 Curran et al c7 mechanism release may 2004  
 !#####  
 !#####  
 ! c7h15 REACTIONS  
 !#####  
 !#####  
 !#####  
 ! 1) C-C bond scission  
 ! 2) C-h bond scission : alkene formation  
 ! 3) oxydation reactions  
 ! 4) isomerisation  
 ! 5) O2 addition  
 !#####

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 1) C-C bond scission  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 !!Ac7h15=Ac5h11+c2h4 2.000E+13 0.00 28700.0  
 ! DE 1701 CW  
 !!Bc7h15=pc4h9+c3h6 2.000E+13 0.00 28700.0  
 ! DE 1740 CW  
 !!Cc7h15=nc3h7+c4h8 2.000E+13 0.00 28700.0  
 ! DE 1736 CW  
 !!Dc7h15=ch3+c6h12-1 2.000E+13 0.00 31000.0  
 ! DE 1737 CN  
 !!Dc7h15=c2h5+c5h10 4.000E+13 0.00 28700.0  
 ! DE 1734 CW  
 Ac7h15=Ac5h11+c2h4 9.120E+11 0.31 27240.5 !  
 High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 Bc7h15=pc4h9+c3h6 6.025E+10 0.84 27823.0 !  
 High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 Cc7h15=nc3h7+c4h8 5.495E+11 0.55 28087.0 !  
 High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 Cc7h15=ch3+c6h12-1 9.550E+09 1.08 29391.0 !  
 High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 Dc7h15=c2h5+c5h10 1.700E+10 1.11 27026.0 !  
 \*2 High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 2) C-h bond scission  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 Ac7h15=h+c7h14-1 3.000E+13 0.00 38000.0 !  
 DE 1702 CN  
 Bc7h15=h+c7h14-1 3.000E+13 0.00 38000.0 !  
 DE 1741 CN  
 Cc7h15=h+c7h14-2 3.000E+13 0.00 38000.0 !  
 DE 1741 CN  
 Dc7h15=h+c7h14-2 3.000E+13 0.00 38000.0 !  
 DE 1738 CN  
 Cc7h15=h+c7h14-3 3.000E+13 0.00 38000.0 !  
 DE 1738 CN  
 Dc7h15=h+c7h14-3 6.000E+13 0.00 38000.0 !  
 DE 1735 CN  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 3) oxydation reactions  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 Ac7h15+o2=c7h14-1+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 !  
 !Bc7h15+o2=c7h14-1+ho2 8.000E+11 0.00 5000.0 !  
 !Cc7h15+o2=c7h14-2+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 !  
 !Dc7h15+o2=c7h14-2+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 !  
 !Cc7h15+o2=c7h14-3+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 !  
 !Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2 3.800E+12 0.00 5000.0 !  
 !Bc7h15+o2=c7h14-1+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988  
 Bc7h15+o2=c7h14-2+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988  
 Cc7h15+o2=c7h14-2+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988  
 Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Pitz 1988  
 Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !

idem sc4h9 Pitz 1988  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 4) isomerisation  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 !Ac7h15=Bc7h15 3.900E+07 0.90 18452.4 /  
 ! rev/ 1.120E+07 1.10 19748.8 /  
 !Ac7h15=Cc7h15 9.200E+07 1.02 12916.1 /  
 ! rev/ 6.160E+07 1.11 14340.1 /  
 !Ac7h15=Dc7h15 8.700E+08 0.95 18290.0 /  
 ! rev/ 1.150E+09 1.04 19711.5 /  
 !  
 !Bc7h15=Cc7h15 3.790E+08 1.05 18937.4 /  
 ! rev/ 8.730E+08 0.95 19062.6 /  
 !Bc7h15=Dc7h15 2.200E+09 1.05 38637.4 /  
 ! rev/ 1.020E+10 0.95 38762.6 /  
 Ac7h15=Bc7h15 2.951E+00 3.08 11017.0 !  
 Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 rev/ 3.31E+00 3.11 13073.0 /  
 Ac7h15=Cc7h15 2.291E+01 2.82 10757.0 !  
 Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 rev/ 1.862E+00 3.16 12849.0 /  
 Ac7h15=Dc7h15 5.130E+00 3.23 16849.0 !  
 Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 rev/ 8.340E-01 3.57 18942.0 /  
 Bc7h15=Cc7h15 1.412E+00 3.32 16146.0 !  
 Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138  
 rev/ 1.412E+00 3.32 16146.0 /  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 5) O2 addition  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 !Ac7h15+o2=c7h15qjA 9.000E+18 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
 !Bc7h15+o2=c7h15qjB 1.700E+19 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)  
 !Cc7h15+o2=c7h15qjC 1.800E+19 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
 !Dc7h15+o2=c7h15qjD 1.800E+19 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
 !Ac7h15+o2=c7h15qjA 4.820E+36 -8.23 5167.0 !  
 !DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2  
 !Bc7h15+o2=c7h15qjB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 !DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !Cc7h15+o2=c7h15qjC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 !DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !Dc7h15+o2=c7h15qjD 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 !DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 5) Alkoxy formation  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 Ac7h15+ho2=c7h15ojA+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc7h15+ho2=c7h15ojB+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002



```

!*****
c7h14rDqA=c5h10+c2h4o2h 2.000E+13 0.00 28700.0 !
c7h14rEqA=c4h8+c3h6ooh1-3 2.000E+13 0.00 28700.0 !
c7h14rEqB=c4h8+c3h6ooh2-1 2.000E+13 0.00 28700.0 !
c7h14rEqC=c3h6+c4h8rDgB 2.000E+13 0.00 28700.0 !
c7h14rEqD=c2h4+c5h10rAgC 2.000E+13 0.00 28700.0 !
c7h14rEqE=c2h4+c5h10rAgB 2.000E+13 0.00 28700.0 !
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c9h18rYqX+o2=c9h18qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rAgB+o2=c7h14qjAgB 4.820E+36 -8.23 5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rAgC+o2=c7h14qjAgC 4.820E+36 -8.23 5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC 4.820E+36 -8.23 5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rAgD+o2=c7h14qjAgD 4.820E+36 -8.23 5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
!c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2 1.840E+45 -11.10 6538.0 !
c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

```

```

c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rAgB+o2=c7h14qjAgB 1.500E+18 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB 1.050E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB 1.700E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c7h14rAgC+o2=c7h14qjAgC 9.000E+18 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC 9.500E+18 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC 1.050E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC 1.700E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC 9.000E+18 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c7h14rAgD+o2=c7h14qjAgD 9.000E+18 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD 1.700E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD 1.050E+19 -2.50 0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!c7h14rAgC=oh+c2h4+nc4h9hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rCqA=oh+ch2o+c6h12-1 5.000E+13 0.00 25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rBqD=oh+nc3h7hco+c3h6 5.000E+13 0.00 25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rDqB=oh+ch3hco+c5h10 5.000E+13 0.00 25500.0 !
Curran 1998
!c7h14rEqC=oh+ethco+c4h8 5.000E+13 0.00 25500.0 !
Curran 1998
c7h14rAgC=oh+c2h4+nc4h9hco 2.660E+04 3.035 24773.0 !
c7h14rCqA=oh+ch2o+c6h12-1 1.470E+13 0.40 28543.0 !
c7h14rBqD=oh+nc3h7hco+c3h6 4.720E+03 3.346 23974.0 !
c7h14rDqB=oh+ch3hco+c5h10 1.420E+05 2.89 24777.0 !
c7h14rEqC=oh+ethco+c4h8 3.960E+04 3.07 24093.0 !
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
! (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
c7h14rBqA=oh+c7h14o-AB 2.950E+11 0.00 22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A

```

```

divided by 2
c7h14rCqA=oh+c7h14o-AC 9.100E+10 0.00 16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rDqA=oh+c7h14o-AD 3.600E+09 0.00 7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c7h14rEqA=oh+c7h14o-AE 1.700E+08 0.00 1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
c7h14rAgB=oh+c7h14o-AB 2.950E+11 0.00 22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rCqB=oh+c7h14o-BC 2.950E+11 0.00 22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rDqB=oh+c7h14o-BD 9.100E+10 0.00 16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rEqB=oh+c7h14o-BE 3.600E+09 0.00 7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c7h14rFqB=oh+c7h14o-BF 1.700E+08 0.00 1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
c7h14rBqC=oh+c7h14o-BC 2.950E+11 0.00 22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rAgC=oh+c7h14o-AC 9.100E+10 0.00 16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rDqC=oh+c7h14o-CD 2.950E+11 0.00 22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rEqC=oh+c7h14o-CE 9.100E+10 0.00 16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rFqC=oh+c7h14o-BE 3.600E+09 0.00 7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
c7h14rGqC=oh+c7h14o-AE 1.700E+08 0.00 1950.0 !
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)
c7h14rCqD=oh+c7h14o-CD 2.950E+11 0.00 22000.0 !
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
c7h14rBqD=oh+c7h14o-BD 9.100E+10 0.00 16600.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)
c7h14rAgD=oh+c7h14o-AD 3.600E+09 0.00 7000.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) c-o breaking
! alkene formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
ho2+c7h14-1=c7h14rAgB 1.500E+11 0.00 7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-1=c7h14rBqA 1.500E+11 0.00 7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-2=c7h14rBqC 1.500E+11 0.00 7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-2=c7h14rCqB 1.500E+11 0.00 7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-3=c7h14rCqD 1.500E+11 0.00 7800.0 !
Curran
ho2+c7h14-3=c7h14rDqC 1.500E+11 0.00 7800.0 !
Curran
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

```

```

!*****
!c7h14qjXqY REACTIONS
!*****
! ketohydroperoxides formation
!*****
c7h14qjBqA=>oh+c7h13oAgB 3.350E+09 1.00 33500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E=2000cal/mol
c7h14qjCqA=>oh+c7h13oAgC 5.750E+08 1.00 26000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E=2000cal/mol
c7h14qjDqA=>oh+c7h13oAgD 9.890E+07 1.00 23000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E=2000cal/mol
c7h14qjEqA=>oh+c7h13oAgE 1.700E+07 1.00 22000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E=2000cal/mol
c7h14qjAgB=>oh+c7h13oBqA 1.675E+09 1.00 30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjCqB=>oh+c7h13oBqC 1.675E+09 1.00 30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjDqB=>oh+c7h13oBqD 2.875E+08 1.00 23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBqE 4.945E+07 1.00 20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBqF 8.495E+06 1.00 19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjAgC=>oh+c7h13oCqA 2.875E+08 1.00 23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB 1.675E+09 1.00 30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD 1.675E+09 1.00 30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE 2.875E+08 1.00 23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF 4.945E+07 1.00 20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG 8.495E+06 1.00 19000.0 !
8-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjAgD=>oh+c7h13oDqA 4.945E+07 1.00 20000.0 !
7-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB 2.875E+08 1.00 23000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC 1.675E+09 1.00 30500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E=2000cal/mol
c7h14qjDqD=>oh+c7h13oDqE 3.350E+09 1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 primary H atoms E=3000cal/mol
c7h14qjEqD=>oh+c7h13oDqF 4.750E+08 1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 primary H atoms E=3000cal/mol
c7h14qjFqD=>oh+c7h13oDqG 9.890E+07 1.00 22000.0 !
7-member ring, 2 primary H atoms E=3000cal/mol
c7h14qjGqD=>oh+c7h13oDqH 1.700E+07 1.00 21000.0 !
8-member ring, 2 primary H atoms E=3000cal/mol
c7h14qjAgE=>oh+c7h13oEgA 1.675E+09 1.00 29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol
c7h14qjBqE=>oh+c7h13oEgB 1.675E+09 1.00 29500.0 !
5-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol
c7h14qjCqE=>oh+c7h13oEgC 2.875E+08 1.00 22000.0 !
6-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol

```

!c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBgE 4.945E+07 1.00 19000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBgF 8.495E+06 1.00 18000.0 !  
8-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjAqC=>oh+c7h13oCqA 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF 4.945E+07 1.00 19000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG 8.495E+06 1.00 18000.0 !  
8-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjAqD=>oh+c7h13oDqA 4.945E+07 1.00 19000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
!c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E=3000cal/mol  
#####  
! c7h13oq REACTIONS  
!#####  
! Ketohydroperoxide decomposition  
!#####  
!c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oAqE=>oh+ethco+c3h6cho-1 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oBqB=>oh+ch3co+nc4h9hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oBqD=>oh+nc3h7hco+ch2coch3 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oBqE=>oh+ch3coc2h4p+ethco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oBqF=>oh+ch3hco+c3h6coch3-1 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oCqA=>oh+ch2o+nc4h9coch2 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oCqD=>oh+c2h5coc2h+ethco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oCqE=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4p 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h5coc3h6-1 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oDqA=>oh+ch2o+nc3h7coc2h4p 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oDqB=>oh+ch3hco+nc3h7coch2 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oDqC=>oh+ethco+c3h7co 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oAqE=>oh+ethco+c3h6cho-1 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
!c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co 1.500E+16 0.00 44500.0 !

c7h13oBgC=>oh+ch3co+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oBgD=>oh+nc3h7hco+ch2coch3 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oBgE=>oh+ch3coc2h4p+ethco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oBgF=>oh+ch3hco+c3h6coch3-1 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oCqA=>oh+ch2o+nc4h9coch2 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oCqD=>oh+c2h5coc+nc3h7hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oCqE=>oh+c2h5coc2h+ethco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oCqF=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h5coc3h6-1 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oDqA=>oh+ch2o+nc3h7coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oDqB=>oh+ch3hco+nc3h7coch2 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c7h13oDqC=>oh+ethco+c3h7co 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
#####  
! c7h14o# REACTIONS  
!#####  
! O-ring decomposition  
!#####  
c7h14o-AB+h=>h2+acrol+pc4h9 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c7h14o-AB+oh=>h2o+acrol+pc4h9 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-AB+ho2=>h2o2+acrol+pc4h9 2.500E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-AB+h=>h2+nc5h11coch2 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-AB+oh=>h2o+nc5h11coch2 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-AB+ho2=>h2o2+nc5h11coch2 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-BC+h=>h2+mvk+nc3h7 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-BC+oh=>h2o+mvk+nc3h7 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-BC+ho2=>h2o2+mvk+nc3h7 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-BC+h=>h2+ch3hco+pc4h9 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-BC+oh=>h2o+ch3hco+pc4h9 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-BC+ho2=>h2o2+ch3hco+pc4h9 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+c2h5 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+c2h5 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+c2h5 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc3h7 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc3h7 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc3h7 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-AC+h=>h2+hco+c6h12-1 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c7h14o-AC+oh=>h2o+hco+c6h12-1 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-AC+ho2=>h2o2+hco+c6h12-1 2.500E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-AC+h=>h2+nc4h9coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !

c7h14o-AC+oh=>h2o+nc4h9coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-AC+ho2=>h2o2+nc4h9coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-BD+h=>h2+c5h10+ch3co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-BD+oh=>h2o+c5h10+ch3co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c5h10+ch3co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-BD+h=>h2+c3h6+c3h7co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-BD+oh=>h2o+c3h6+c3h7co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c3h7co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-CE+h=>h2+c4h8+c2h5co 4.800E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-CE+oh=>h2o+c4h8+c2h5co 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-AD+h=>h2+ch2hco+c5h10 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
!c7h14o-AD+oh=>h2o+ch2hco+c5h10 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
!c7h14o-AD+ho2=>h2o2+ch2hco+c5h10 2.400E+13 0.00 5955.0 !  
! idem oxirane+ch2  
!c7h14o-AD+ho2=>h2o2+ch2hco+c5h10 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-AD+h=>h2+nc3h7coc3h6-1 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-AD+oh=>h2o+nc3h7coc3h6-1 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-AD+ho2=>h2o2+nc3h7coc3h6-1 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-BE+h=>h2+c4h8+ch2coch3 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-BE+oh=>h2o+c4h8+ch2coch3 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c4h8+ch2coch3 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-BE+h=>h2+c3h6+c2h5coc2h 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-BE+oh=>h2o+c3h6+c2h5coc2h 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5coc2h 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-AE+h=>h2+ch2ch2hco+c4h8 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c7h14o-AE+oh=>h2o+ch2ch2hco+c4h8 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-AE+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c4h8 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-AE+h=>h2+c2h4+c2h5coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-AE+oh=>h2o+c2h4+c2h5coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
c7h14o-BF+h=>h2+c2h4+c3h6coch3-1 4.800E+08 1.50 2005.0 !  
c7h14o-BF+oh=>h2o+c2h4+c3h6coch3-1 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c7h14o-BF+ho2=>h2o2+c2h4+c3h6coch3-1 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377  
#####  
! c7h14 REACTIONS  
!#####  
!#####  
! 1) addition of h and Ch3

! 2) addition of Oh  
! 3) addition of O  
! 4) addition of ho2  
! 5) decomposition by R  
!#####  
c7h14-l=pc4h9+ac3h5 2.500E+16 0.00 70000.0 !  
Yahyaoui  
c2h3+Ac5h11=c7h14-1 1.000E+13 0.00 0.0 !  
Yahyaoui  
c7h14-l=c3h6+c4h8 4.000E+12 0.00 57430.0 !  
Yahyaoui  
Ec5h9-1+c2h5=c7h14-1 1.000E+13 0.00 0.0 !  
TER 5468  
Cc7h13-1+h=c7h14-1 1.000E+13 0.00 0.0 !  
Yahyaoui  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 2) addition of Oh  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
!c7h14-1+oh=>ch3+c5h11hco 1.400E+12 0.00 -900.0 !  
!c7h14-1+oh=>ch2o+Ac6h13 1.400E+12 0.00 -900.0 !  
!c7h14-1+oh=>ch3+c5h11hco 1.000E+11 0.00 -4000.0 !  
Westbrook 2009  
c7h14-1+oh=>ch2o+Ac6h13 1.000E+11 0.00 -4000.0 !  
Westbrook 2009  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 3) addition of O  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
c7h14-1+o=Cc7h13-1+ho2 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
!c7h14-1+o=>ch2co+ch3+h+2c2h4 3.400E+07 1.83 550.0 !  
! AO2 5222  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 5) decomposition by R  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
c7h14-1+o2=Cc7h13-1+ho2 4.000E+12 0.00 40000.0 !  
idem 1-hexene  
c7h14-1+ho2=h2o2+Cc7h13-1 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c7h14-1+oh=Cc7h13-1 4.000E+13 0.00 4000.0 !  
idem 1-hexene  
c7h14-1+h=h2+Cc7h13-1 6.550E+12 0.00 4445.0 !  
idem 1-hexene  
c7h14-1+oh=h2o+Cc7h13-1 4.186E+06 2.00 -543.0 !  
idem c4h8  
c7h14-1+ch3=ch4+Cc7h13-1 2.000E+11 0.00 6800.0 !  
idem 1-hexene  
c7h14-1+c2h3=c2h4+Cc7h13-1 2.000E+11 0.00 6800.0 !  
idem 1-hexene  
c7h14-1+nc3h7=c3h8+Cc7h13-1 1.000E+11 0.00 8300.0 !  
idem 1-hexene

c7h14-1+oh=h2o+c5h8-14+c2h5 1.125E+06 2.00 -1391.0 !  
idem n-alkanes  
c7h14-1+oh=h2o+c4h8+ac3h5 1.125E+06 2.00 -1391.0 !  
idem n-alkanes  
c7h14-1+oh=h2o+c3h6+dc4h7-1 1.000E+06 2.00 -597.0 !  
idem n-alkanes  
c7h14-1+oh=h2o+c2h4+ec5h9-1 7.050E+06 1.80 974.0 !  
idem n-alkanes  
Cc7h13-1=c4h6+nc3h7 1.339E+15 -0.52 38320.0 !  
Curran  
Cc7h13-1+ho2=pc4h9+acrol+oh 1.000E+12 0.00 8000.0 !  
Yahyaoui

c7h14-2+h-h2+c2h5+c5h8-13 1.700E+05 2.50 2490.0 !  
c7h14-2+oh=h2o+c2h5+c5h8-13 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c7h14-2+ho2=h2o+c2h5+c5h8-13 9.600E+03 2.60 13900.0 !  
c7h14-2+ch3=ch4+c2h5+c5h8-13 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c7h14-2+ch3o2=ch3o2h+c2h5+c5h8-13 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c7h14-2+c2h5=c2h6+c2h5+c5h8-13 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c7h14-2+o=oh+c2h5+c5h8-13 6.000E+10 0.70 7682.0 !  
c7h14-3+h-h2+c2h5+c5h8-13 1.700E+05 2.50 2490.0 !  
c7h14-3+oh=h2o+c2h5+c5h8-13 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c7h14-3+ho2=h2o+c2h5+c5h8-13 9.600E+03 2.60 13900.0 !  
c7h14-3+ch3=ch4+c2h5+c5h8-13 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c7h14-3+ch3o2=ch3o2h+c2h5+c5h8-13 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c7h14-3+c2h5=c2h6+c2h5+c5h8-13 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c7h14-3+o=oh+c2h5+c5h8-13 6.000E+10 0.70 7682.0 !  
c7h14-2+oh=>ch3co+Ac5h11 1.400E+12 0.00 -900.0 !  
c7h14-2+oh=>c2h5+nc4h9hco 1.400E+12 0.00 -900.0 !  
c7h14-3+oh=>ethco+pc4h9 1.400E+12 0.00 -900.0 !  
c7h14-3+oh=>nc3h7+nc3h7hco 1.400E+12 0.00 -900.0 !

!#####  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
! heptanal REACTIONS  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
!#####

c6h13cco+h=h2+c6h13co 4.000E+13 0.00 4200.0 !  
ALD 5352  
c6h13cco+oh=h2o+c6h13co 4.200E+12 0.00 500.0 !  
ALD 5353  
c6h13cco+ho2=h2o2+c6h13co 1.000E+12 0.00 10000.0 !  
ALD 5354  
c6h13cco+ch3=ch4+c6h13co 2.0E-0006 5.60 2500.0 !  
ALD 5355  
c6h13cco+c2h5=c2h6+c6h13co 1.300E+12 0.00 8500.0 !  
ALD 5356  
c6h13co+M=co+Ac6h13M 8.640E+15 0.00 14400.0 !  
c6h13co+ho2=co2+oh+Ac6h13 2.000E+13 0.00 0.0 !

!#####  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
! heptanone REACTIONS  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
!#####

heptanone+h=>h2+ch2co+ch3+2c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !

FCO 5426  
heptanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+2c2h4 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
FCO 5427  
heptanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+2c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
FCO 5428  
heptanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+2c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
FCO 5429  
heptanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+2c2h4 6.000E+11 0.00  
9600.0 ! FCO 5430  
heptanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+2c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
FCO 5431

!#####  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
! hept-6-enal c6h11hco reactions  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
!#####

c6h11hco=Fc6h11-1+hco 7.250E+16 0.00 82400.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+o2=c6h11co+ho2 2.000E+13 0.50 42200.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+ho2=c6h11co+h2o2 1.700E+12 0.00 10700.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+oh=c6h11co+h2o 2.350E+10 0.73 -1113.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+o=c6h11co+oh 5.850E+12 0.00 1808.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+h=c6h11co+h2 5.540E+02 3.50 5167.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+ch3=c6h11co+ch4 2.250E+00 4.00 8285.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+c2h5=c6h11co+c2h6 1.640E+00 3.65 9141.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+hco=c6h11co+ch2o 4.700E+04 2.72 18235.0 !  
idem ethco  
c6h11hco+c2h3=c6h11co+c2h4 8.500E+09 0.0 6000.0 !  
idem ethco

!#####  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
!c6h11co reactions hept-6-enoyle  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
!#####

c6h11co=Fc6h11-1+co 2.000E+13 0.00 28700.0 !  
Curran c2h5co=c2h5+co! idem ethco Konnov

!#####  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
! heptanone REACTIONS  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
!#####

!\*\*\*\* 3-methylhexa-1,5-diene mhd \*\*\*\*  
!#####

mhd=>Cc4h7-1+ac3h5 5.000E+15 0.00 72800.0 !  
(SCHARFE85)  
mhd=>ch3+c6h9 5.000E+16 0.00 73000.0 !  
(SCHARFE85)

!#####  
!\*\*\*\* Radical 3-methylene hex-1-yle F2c4h614 \*\*\*\*  
!#####

F2c4h614=F2c4h513+h 4.260E+13 0.00 38600.0 !  
(id Ac5h11/RTI)  
!#####  
!\*\*\*\* 3-methylene hex-1-ene F2c4h513 \*\*\*\*  
!#####

F2c4h513=>isopy+c2h5 1.000E+16 0.00 71000.0 !  
(RTI id AC15h30)

F2c4h513+h=F2c4h4134+h2 6.550E+12 0.00 4445.0 !  
idem c6h12+h Yahyaoui  
F2c4h513+oh=F2c4h4134+h2o 3.000E+12 0.00 1230.0 !  
idem c6h12+oh Yahyaoui/2  
F2c4h513+ho2=F2c4h4134+h2o2 1.000E+11 0.00 17060.0 !  
idem c6h12+ho2 Yahyaoui  
F2c4h513+o2=F2c4h4134+ho2 4.000E+12 0.00 40000.0 !  
idem c6h12+o2 Yahyaoui  
F2c4h513+ch3=F2c4h4134+ch4 2.000E+11 0.00 6800.0 !  
idem c6h12+ch3 Yahyaoui

F2c4h4134=>c2h3+c5h8-12 1.000E+11 0.00 37000.0 !  
idem Dc7h13-1=c2h3+c5h10  
c5h8-12=>c3h3+c2h5 2.000E+15 0.00 75000.0 !  
idem C6h1012 Yahyaoui  
c5h8-12=c5h8-13 2.500E+13 0.00 63000.0 !  
idem C6h1012 Yahyaoui

!#####  
!\*\*\*\* hept-3-en-1-yle radical Ac7h13-3 \*\*\*\*  
!#####

Ac7h13-3=c2h4+Ac5h9-1 1.000E+11 0.00 37000.0 !  
(WESTB.87)  
Ac7h13-3=c7h12-13+h 4.260E+13 0.00 38600.0 !  
(id c5h11/RTI)

!#####  
!\*\*\*\* hept-1-en-4-yle radical Dc7h13-1 \*\*\*\*  
!#####

Dc7h13-1=c2h3+c5h10 1.000E+11 0.00 37000.0 !  
(WESTB.87)  
Dc7h13-1=c7h12-13+h 4.260E+13 0.00 38600.0 !  
(id c5h11/RTI)

!#####  
!\*\*\*\* hepta-1,6-diene c7h12-16 \*\*\*\*  
!#####

c7h12-16=ac3h5+Dc4h7-1 1.000E+16 0.00 71000.0 !  
(RTI id AC15h30)

!#####  
!\*\*\*\* hepta-1,3-diene c7h12-13 \*\*\*\*  
!#####

!#####  
c7h12-13=c5h7+c2h5 1.000E+16 0.00 71000.0 !  
(RTI id AC15h30)

!#####  
!AAAAAAAAAAAAAAAAAAAA  
! SOUS-mECANISMe C8  
!#####

nc8h18=pc4h9+pc4h9 2.000E+17 0.00 83180.0 !  
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595  
nc8h18=nc3h7+Ac5h11 2.000E+17 0.00 83400.0 !  
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595  
nc8h18=c2h5+Ac6h13 2.000E+17 0.00 83680.0 !  
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595  
nc8h18=ch3+Ac7h15 2.000E+17 0.00 85570.0 !  
idem n-dcane Zeppieri et al. Proc. Comb. Inst. 2000 vol. 28 pp. 1587-1595

nc8h18=h+Ac8h17 1.000E+15 0.00 100000.0 !  
mati  
nc8h18=h+Bc8h17 1.000E+15 0.00 100000.0 !  
mati  
nc8h18=h+Cc8h17 1.000E+15 0.00 100000.0 !  
mati  
nc8h18=h+Dc8h17 1.000E+15 0.00 100000.0 !  
mati

!#####  
! Bimolecular initiation  
!nc8h18+o2=ho2+c10h21  
!#####

nc8h18+o2=ho2+Ac8h17 4.000E+13 0.000 50870.0 !  
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
nc8h18+o2=ho2+Bc8h17 8.000E+13 0.000 47690.0 !  
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
nc8h18+o2=ho2+Cc8h17 8.000E+13 0.000 47690.0 !  
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
nc8h18+o2=ho2+Dc8h17 8.000E+13 0.000 47690.0 !  
Tsang et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-

!#####  
! METATHESIS REACTIONS  
!#####

!#####  
! metathesis reactions  
! nc8h18+X=hX+c10h21  
! X= oh, ho2, h, o, ch3, c2h5, c2h3



```

! ac3h5, sc3h5, tc3h5, hco, ch3o
!*****

nc8h18+oh+h2o+Ac8h17      1.410E+07      1.80      973.7 !
mat1
nc8h18+oh+h2o+Bc8h17      1.990E+06      2.00     -596.2 !
mat1
nc8h18+oh+h2o+Cc8h17      2.250E+06      2.00    -1391.0 !
mat1
nc8h18+oh+h2o+Dc8h17      2.250E+06      2.00   -1391.0 !
mat1

nc8h18+h2o2+Ac8h17        3.600E+04      2.50   16683.0 !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc8h18+h2o2+Bc8h17        4.000E+04      2.50   14208.0 !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc8h18+h2o2+Cc8h17        4.000E+04      2.50   14208.0 !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365
nc8h18+h2o2+Dc8h17        4.000E+04      2.50   14208.0 !
according Scott et al, Comb&Flame, 2002, vol.129, p. 365

nc8h18+h+h2+Ac8h17        5.700E+07      2.00      7700.0 !
mE 2942 CW
nc8h18+h+h2+Bc8h17        1.800E+07      2.00      5000.0 !
mE 2943 CW
nc8h18+h+h2+Cc8h17        1.800E+07      2.00      5000.0 !
mE 2944 CW
nc8h18+h+h2+Dc8h17        1.800E+07      2.00      5000.0 !
mE 2945 CW

o+nc8h18+oh+Ac8h17        1.000E+14      0.00      7850.0 !
mE 2937 CW
o+nc8h18+oh+Bc8h17        5.200E+13      0.00      5200.0 !
mE 2938 CW
o+nc8h18+oh+Cc8h17        5.200E+13      0.00      5200.0 !
mE 2939 CW
o+nc8h18+oh+Dc8h17        5.200E+13      0.00      5200.0 !
mE 2940 CW

nc8h18+ch3=ch4+Ac8h17      6.000E-01      4.00      8200.0 !
mE 2957 CN
nc8h18+ch3=ch4+Bc8h17      4.000E+11      0.00      9600.0 !
mE 2958 CN
nc8h18+ch3=ch4+Cc8h17      4.000E+11      0.00      9600.0 !
mE 2959 CN
nc8h18+ch3=ch4+Dc8h17      4.000E+11      0.00      9600.0 !
mE 2960 CN

nc8h18+c2h5=c2h6+Ac8h17    6.000E+11      0.00     13500.0 !
mE 2992 CR
nc8h18+c2h5=c2h6+Bc8h17    4.000E+11      0.00     11000.0 !
mE 2993 CN
nc8h18+c2h5=c2h6+Cc8h17    4.000E+11      0.00     11000.0 !
mE 2994 CN
nc8h18+c2h5=c2h6+Dc8h17    4.000E+11      0.00     11000.0 !
mE 2995 CN

nc8h18+hco=ch2o+Ac8h17     2.000E+05      2.50     18500.0 !
mE 2962 CN
nc8h18+hco=ch2o+Bc8h17     2.200E+07      1.90     17000.0 !
mE 2963 CN
nc8h18+hco=ch2o+Cc8h17     2.200E+07      1.90     17000.0 !
mE 2964 CN
nc8h18+hco=ch2o+Dc8h17     2.200E+07      1.90     17000.0 !

```

```

mE 2965 CN

nc8h18+ch3o=ch3oh+Ac8h17  3.200E+11      0.00     7300.0 ! mE
2972 CN
nc8h18+ch3o=ch3oh+Bc8h17  2.900E+11      0.00     4500.0 ! mE
2973 CN
nc8h18+ch3o=ch3oh+Cc8h17  2.900E+11      0.00     4500.0 ! mE
2974 CN
nc8h18+ch3o=ch3oh+Dc8h17  2.900E+11      0.00     4500.0 ! mE
2975 CN

nc8h18+ch2oh=ch3oh+Ac8h17  2.000E+02      2.95     14000.0 !
mE 2967 CN
nc8h18+ch2oh=ch3oh+Bc8h17  1.200E+02      2.95     12000.0 !
mE 2968 CN
nc8h18+ch2oh=ch3oh+Cc8h17  1.200E+02      2.95     12000.0 !
mE 2969 CN
nc8h18+ch2oh=ch3oh+Dc8h17  1.200E+02      2.95     12000.0 !
mE 2970 CN

nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Ac8h17  1.200E+13      0.00     20000.0 !
mE 2977 CN
nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Bc8h17  6.000E+12      0.00     17500.0 !
mE 2978 CN
nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Cc8h17  6.000E+12      0.00     17500.0 !
mE 2979 CN
nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Dc8h17  6.000E+12      0.00     17500.0 !
mE 2980 CN

nc8h18+ch2hco=ch3hco+Ac8h17  6.000E+11      0.00     13700.0 !
mE 3002 CR
nc8h18+ch2hco=ch3hco+Bc8h17  4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3003 CR
nc8h18+ch2hco=ch3hco+Cc8h17  4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3004 CR
nc8h18+ch2hco=ch3hco+Dc8h17  4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3005 CR

nc8h18+ch3co=ch3hco+Ac8h17  3.000E+11      0.00     15000.0 !
mE 3007 CR
nc8h18+ch3co=ch3hco+Bc8h17  2.000E+11      0.00     12700.0 !
mE 3008 CR
nc8h18+ch3co=ch3hco+Cc8h17  2.000E+11      0.00     12700.0 !
mE 3009 CR
nc8h18+ch3co=ch3hco+Dc8h17  2.000E+11      0.00     12700.0 !
mE 3010 CR

nc8h18+nc3h7=c3h8+Ac8h17    6.000E+11      0.00     13700.0 !
mE 3032 CR
nc8h18+nc3h7=c3h8+Bc8h17    4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3033 CR
nc8h18+nc3h7=c3h8+Cc8h17    4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3034 CR
nc8h18+nc3h7=c3h8+Dc8h17    4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3035 CR

nc8h18+pc4h9=c4h10+Ac8h17   6.000E+11      0.00     13700.0 !
mE 3037 CR
nc8h18+pc4h9=c4h10+Bc8h17   4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3038 CR
nc8h18+pc4h9=c4h10+Cc8h17   4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3039 CR
nc8h18+pc4h9=c4h10+Dc8h17   4.000E+11      0.00     11400.0 !
mE 3040 CR

```

```

nc8h18+ac3h5=c3h6+Ac8h17    1.200E+02      3.30     19840.0 !
nc8h18+ac3h5=c3h6+Bc8h17    8.000E+01      3.30     18170.0 !
nc8h18+ac3h5=c3h6+Cc8h17    8.000E+01      3.30     18170.0 !
nc8h18+ac3h5=c3h6+Dc8h17    8.000E+01      3.30     18170.0 !

nc8h18+o2cho=Ac8h17+ho2cho    1.680E+13      0.00     20440.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc8h18+o2cho=Bc8h17+ho2cho    1.120E+13      0.00     17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc8h18+o2cho=Cc8h17+ho2cho    1.120E+13      0.00     17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004
nc8h18+o2cho=Dc8h17+ho2cho    1.120E+13      0.00     17690.0 !
Curran et al c7 mechanism release may 2004

!*****
! 1) C-C bond scission
! 2) C-h bond scission : alkene formation
! 3) oxydation reactions
! 4) isomerisation
! 5) O2 addition
!*****

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) C-C bond scission
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!Ac8h17=Ac6h13+c2h4          2.000E+13      0.00     28700.0 !
DE 1703 CW
!!Dc8h17=nc3h7+c5h10          2.000E+13      0.00     28700.0 !
DE 1743 CW
!!Dc8h17=c2h5+c6h12-1        2.000E+13      0.00     28700.0 !
DE 1744 CW
!!Cc8h17=pc4h9+c4h8          2.000E+13      0.00     28700.0 !
DE 1747 CW
!!Cc8h17=ch3+c7h14-1         2.000E+13      0.00     31000.0 !
DE 1748 CW
!!Bc8h17=Ac5h11+c3h6         2.000E+13      0.00     28700.0 !
DE 1751 CW

Ac8h17=Ac6h13+c2h4            9.120E+11      0.31     27240.5 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Bc8h17=Ac5h11+c3h6            6.025E+10      0.84     27822.8 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Cc8h17=pc4h9+c4h8            2.041E+13      0.04     28496.5 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Cc8h17=ch3+c7h14-1            9.550E+09      1.08     29390.7 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Dc8h17=nc3h7+c5h10            5.495E+11      0.55     28087.1 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
Dc8h17=c2h5+c6h12-1            8.510E+09      1.11     27025.9 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scission
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

```

```

Ac8h17+h+c8h16-1             3.000E+13      0.00     38000.0 !
DE 1704 CN
Bc8h17+h+c8h16-1             3.000E+13      0.00     38000.0 !
DE 1704 CN
Bc8h17+h+c8h16-2             3.000E+13      0.00     38000.0 !
DE 1704 CN
Cc8h17+h+c8h16-2             3.000E+13      0.00     38000.0 !
DE 1704 CN
Cc8h17+h+c8h16-3             3.000E+13      0.00     38000.0 !
DE 1704 CN
Dc8h17+h+c8h16-3             3.000E+13      0.00     38000.0 !
DE 1704 CN
Dc8h17+h+c8h16-4             3.000E+13      0.00     38000.0 !
DE 1704 CN

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac8h17+o2=c8h16-1+ho2        1.900E+12      0.00     5000.0 !
! OX 2574 CN
Dc8h17+o2=c8h16-4+ho2        1.900E+12      0.00     5000.0 !
! OX 2596 CN
Dc8h17+o2=c8h16-3+ho2        1.900E+12      0.00     5000.0 !
! OX 2597 CN
Cc8h17+o2=c8h16-3+ho2        1.900E+12      0.00     5000.0 !
! OX 2598 CN
Cc8h17+o2=c8h16-2+ho2        1.900E+12      0.00     5000.0 !
! OX 2599 CN
Bc8h17+o2=c8h16-2+ho2        1.900E+12      0.00     5000.0 !
! OX 2600 CN
Bc8h17+o2=c8h16-1+ho2        8.100E+11      0.00     5000.0 !
! OX 2601 CN

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac8h17=Cc8h17                 2.951E+00      3.08     11017.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
rev / 3.311E+00 3.11 13074.0 /
Ac8h17=Dc8h17                 6.520E-03      3.95     9665.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
rev / 5.300E-04 4.29 11757.0 /

Bc8h17=Cc8h17                 1.862E+00      3.27     13199.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
rev / 2.138E+01 2.96 13165.0 /
Bc8h17=Dc8h17                 1.412E+00      3.32     16146.0 !
High-pressure limit Tsang et al. 2009 Proc. Comb. Ins. 32 pp. 131-138
rev / 1.177E+00 3.32 16152.0 /

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) O2 addition
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac8h17+o2=c8h17qjA           4.820E+36      -8.23     5167.0 !
DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2
!Bc8h17+o2=c8h17qjB           1.840E+45      -11.10     6538.0 !
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2
!Cc8h17+o2=c8h17qjC           1.840E+45      -11.10     6538.0 !

```

DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
!Dc8h17+o2=c8h17qjD 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
!Ac8h17+o2=c8h17qjA 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks) 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
!Bc8h17+o2=c8h17qjB 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
!Cc8h17+o2=c8h17qjC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
!Dc8h17+o2=c8h17qjD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.70-186 (2ks)

!#####  
!#####  
! c8h17qj REACTIONS  
!#####  
!#####

!\*\*\*\*\*  
! 1) isomerisation to QOOH  
! 2) dismutations with ho2  
! ROOH formation  
!\*\*\*\*\*

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 1) isomerisation to QOOH  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h17qjA=c8h16rBqA 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjA=c8h16rCqA 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjA=c8h16rDqA 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjA=c8h16rEqA 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjB=c8h16rAqB 5.030E+09 1.00 35000.0 !  
5-member ring, 3 primary H atoms  
c8h17qjB=c8h16rCqB 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjB=c8h16rDqB 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjB=c8h16rEqB 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjB=c8h16rFqB 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjC=c8h16rAqC 8.630E+08 1.00 28000.0 !  
6-member ring, 3 primary H atoms  
c8h17qjC=c8h16rBqC 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjC=c8h16rDqC 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjC=c8h16rEqC 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjC=c8h16rFqC 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjC=c8h16rGqC 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjD=c8h16rAqD 1.480E+08 1.00 25000.0 !  
7-member ring, 3 primary H atoms

c8h17qjD=c8h16rBqD 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjD=c8h16rCqD 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjD=c8h16rEqD 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjD=c8h16rFqD 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjD=c8h16rGqD 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c8h17qjD=c8h16rHqD 2.500E+07 1.00 24000.0 !  
8-member ring, 3 primary H atoms

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 2) dismutations with ho2  
! ROOH formation  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h17qjA+ho2=nc8h17o2h+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran  
c8h17qjB+ho2=nc8h17o2h+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran  
c8h17qjC+ho2=nc8h17o2h+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran  
c8h17qjD+ho2=nc8h17o2h+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran

!#####  
!#####  
! c8h16rXqj REACTIONS  
!#####  
!#####

!\*\*\*\*\*  
! 1) isomerisation  
! 2) addition to o2  
! 3) o-o and c-c breaking  
! 4) o-o breaking  
! 5) o-rings formation  
! 6) c-o breaking  
! 7) c-c breaking  
! 8) c-h breaking  
! 9) oxidation  
!\*\*\*\*\*

!\*\*\*\*\*  
! 1) isomerisation  
! 2) addition to o2  
! 3) o-o and c-c breaking  
! 4) o-o breaking  
! 5) o-rings formation  
! 6) c-o breaking  
! 7) c-c breaking  
! 8) c-h breaking  
! 9) oxidation  
!\*\*\*\*\*

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 2) addition to o2  
! c9h18rYqX+o2=c9h18qjYqX  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16rBqA+o2=c8h16qjBqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rCqA+o2=c8h16qjCqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rDqA+o2=c8h16qjDqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rEqA+o2=c8h16qjEqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.500E+18 -2.50 0.0 !  
c8h16rAqB+o2=c8h16qjAqB 1.500E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt) 1.050E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rCqB+o2=c8h16qjCqB 1.050E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rDqB+o2=c8h16qjDqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rEqB+o2=c8h16qjEqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rFqB+o2=c8h16qjFqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks) 9.500E+18 -2.50 0.0 !  
c8h16rBqC+o2=c8h16qjBqC 9.500E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt) 1.050E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rDqC+o2=c8h16qjDqC 1.050E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rEqC+o2=c8h16qjEqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rFqC+o2=c8h16qjFqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rGqC+o2=c8h16qjGqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks) 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks) 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
c8h16rAqD+o2=c8h16qjAqD 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks) 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rBqD+o2=c8h16qjBqD 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks) 1.050E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rCqD+o2=c8h16qjCqD 1.050E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rDqD+o2=c8h16qjDqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rEqD+o2=c8h16qjEqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks) 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
c8h16rFqD+o2=c8h16qjFqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks) 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
c8h16rGqD+o2=c8h16qjGqD 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks) 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 3) o-o and c-c breaking  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16rAqC=>oh+c2h4+c5h11hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
c8h16rCqA=>oh+ch2o+c7h14-1 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
c8h16rBqD=>oh+c3h6+nc4h9hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
c8h16rDqB=>oh+c6h12-1+ch3hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
c8h16rFqD=>oh+c4h8+nc3h7hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
c8h16rEqC=>oh+ethco+c5h10 5.000E+13 0.00 25500.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 5) o-rings formation  
! (o-o breaking)  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16rBqA+oh+c8h16o#3 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c8h16rCqA+oh+c8h16o#4 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
c8h16rDqA+oh+c8h16o#5 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
c8h16rEqA+oh+c8h16o#6 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
c8h16rAqB+oh+c8h16o#3 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c8h16rCqB+oh+c8h16o#3 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c8h16rDqB+oh+c8h16o#4 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
c8h16rEqB+oh+c8h16o#5 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
c8h16rFqB+oh+c8h16o#6 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
c8h16rBqC+oh+c8h16o#3 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c8h16rAqC+oh+c8h16o#4 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
c8h16rDqC+oh+c8h16o#3 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c8h16rEqC+oh+c8h16o#4 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
c8h16rFqC+oh+c8h16o#5 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
c8h16rGqC+oh+c8h16o#6 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
c8h16rCqD+oh+c8h16o#3 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c8h16rBqD+oh+c8h16o#4 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
c8h16rAqD+oh+c8h16o#5 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
c8h16rEqD+oh+c8h16o#6 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
c8h16rFqD+oh+c8h16o#3 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c8h16rDqD+oh+c8h16o#4 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
c8h16rEqD+oh+c8h16o#5 2.100E+08 0.00 6500.0 !

Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
c8h16HqD=oh+c8h16o#6 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 6) c-o breaking  
! alkene formation  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16AqB=ho2+c8h16-1 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2124 CR  
c8h16BqA=ho2+c8h16-1 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 1817 CR  
c8h16BqC=ho2+c8h16-2 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2102 CR  
c8h16CqB=ho2+c8h16-2 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2126 CR  
c8h16CqD=ho2+c8h16-3 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2078 CR  
c8h16DqC=ho2+c8h16-3 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2108 CR  
c8h16EqD=ho2+c8h16-4 8.500E+12 0.00 26000.0 !  
DE 2088 CR

! c8h16gJxqY REACTIONS  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! ketohydroperoxides formation  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16gJbqA=oh+c8h15oAqB 3.350E+09 1.00 33500.0 !  
5-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol  
c8h16gJcqa=oh+c8h15oAqC 5.750E+08 1.00 26000.0 !  
6-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol  
c8h16gJdqA=oh+c8h15oAqD 9.890E+07 1.00 23000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atoms E-2000cal/mol  
c8h16gJeqA=oh+c8h15oAqE 1.700E+07 1.00 22000.0 !  
8-member ring, 2 primary H atoms E-2000cal/mol  
  
c8h16gJaqB=oh+c8h15oBqA 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJcqb=oh+c8h15oBqC 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJdqB=oh+c8h15oBqD 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJeqB=oh+c8h15oBqE 4.945E+07 1.00 20000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJfqB=oh+c8h15oBqF 8.495E+06 1.00 19000.0 !  
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
  
c8h16gJbqC=oh+c8h15oCqB 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJcqaC=oh+c8h15oCqA 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJdqC=oh+c8h15oCqD 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJeqC=oh+c8h15oCqE 2.875E+08 1.00 23000.0 !

6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJfqC=oh+c8h15oCqF 4.945E+07 1.00 20000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJgqC=oh+c8h15oCqG 8.495E+06 1.00 19000.0 !  
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
  
c8h16gJcqD=oh+c8h15oDqC 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJbqD=oh+c8h15oDqB 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJaqD=oh+c8h15oDqA 4.945E+07 1.00 20000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJeqD=oh+c8h15oDqE 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJfqD=oh+c8h15oDqF 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJgqD=oh+c8h15oDqG 4.945E+07 1.00 20000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c8h16gJhqD=oh+c8h15oDqH 8.495E+06 1.00 19000.0 !  
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

! nc8h17o2h and c8h15o2h REACTIONS  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! hydroperoxydes decomposition  
nc8h17o2h=>oh+ch3hco+2c2h4+c2h5 1.500E+16 0.00 42000.0 !  
DKh 4883

! c8h15oq REACTIONS  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! Ketohydroperoxide decomposition  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h15oAqB=oh+hco+c6h13hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oAqC=oh+ch2hco+c5h11hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oAqD=oh+ch2ch2hco+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oAqE=oh+c3h6cho-1+nc3h7hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
  
c8h15oBqA=oh+ch2o+c6h13co 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oBqC=oh+ch3co+c5h11hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oBqD=oh+ch2coch3+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oBqE=oh+ch3coc2h4p+nc3h7hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oBqF=oh+c3h6coch3-1+ethco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
  
c8h15oCqA=oh+ch2o+nc5h11coch2 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oCqB=oh+c3h3co+c5h11co 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oCqD=oh+c2h5coc2h4p+nc3h7hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oCqE=oh+c2h5coc2h4p+ethco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oCqF=oh+c2h5coc3h6-1+ch3hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
  
c8h15oDqA=oh+ch2o+nc4h9coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oDqB=oh+ch3hco+nc4h9coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !

c8h15oDqC=oh+ethco+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oDqD=oh+c3h7co+nc3h7hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oDqE=oh+nc3h7coc2h4p+ethco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oDqG=oh+nc3h7coc2h4p+ch3hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c8h15oDqH=oh+ch2o+nc3h7coc3h6-1 1.500E+16 0.00 44500.0 !

! c8h16o#x REACTIONS  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! 0-ring decomposition  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16o#3+h=>h2+ch2co+c2h5+2c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
DOR 4977  
c8h16o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5+2c2h4 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
DOR 4978  
c8h16o#3+h2o=>h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
DOR 4979  
c8h16o#3+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 4980  
c8h16o#3+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 4981  
c8h16o#3+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
DOR 4982  
c8h16o#3+o=>oh+ch2hco+3c2h4 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
DOR 5120  
  
c8h16o#4+h=>h2+ch2hco+3c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
DOR 5067  
c8h16o#4+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
DOR 5068  
c8h16o#4+h2o=>h2o2+ch2hco+3c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
DOR 5069  
c8h16o#4+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 5070  
c8h16o#4+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4 4.500E+12 0.00 17500.0 !  
DOR 5071  
c8h16o#4+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
DOR 5072  
c8h16o#4+o=>oh+ch2hco+3c2h4 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
DOR 5121  
  
c8h16o#5+h=>h2+ch2hco+3c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
DOR 5073  
c8h16o#5+oh=>h2o+c6h12-1+ch2hco 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
c8h16o#5+oh=>h2o+ch2co+pc4h9+c2h4 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
c8h16o#5+oh=>h2o+c3h10+ch2coc3 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
c8h16o#5+oh=>h2o+c3h6+nc3h7coc2 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
!  
c8h16o#5+h2o=>h2o2+ch2hco+3c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
DOR 5075  
c8h16o#5+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 5076  
c8h16o#5+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4 4.500E+12 0.00 17500.0 !  
DOR 5077  
c8h16o#5+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
DOR 5078  
c8h16o#5+o=>oh+ch2hco+3c2h4 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
DOR 5122

c8h16o#6+h=>h2+ch2hco+3c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !  
DOR 5079  
c8h16o#6+oh=>h2o+ch2hco+3c2h4 7.800E+06 2.00 -765.0 !  
DOR 5080  
c8h16o#6+h2o=>h2o2+ch2hco+3c2h4 1.200E+12 0.00 15500.0 !  
DOR 5081  
c8h16o#6+ch3=>ch4+ch2hco+3c2h4 6.000E+11 0.00 9600.0 !  
DOR 5082  
c8h16o#6+ch3o2=>ch3o2h+ch2hco+3c2h4 4.500E+12 0.00 17500.0 !  
DOR 5083  
c8h16o#6+c2h5=>c2h6+ch2hco+3c2h4 6.000E+11 0.00 11000.0 !  
DOR 5084  
c8h16o#6+o=>oh+ch2hco+3c2h4 7.800E+13 0.00 5200.0 !  
DOR 5123

! c8h16 REACTIONS  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! 1) addition of h and CH3  
! 2) addition of Oh  
! 3) addition of O  
! 4) addition of ho2  
! 5) decomposition by R  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c8h16-1+ch3=Ac6h13+c3h6 9.600E+10 0.00 8000.0 !  
ROL 5185  
  
c8h16-1+Ac5h11+ac3h5 2.500E+16 0.00 70000.0 !  
Yahyaoui  
c2h3+Ac6h13=c8h16-1 1.000E+13 0.00 0.0 !  
Yahyaoui  
c8h16-1=c3h6+c5h10 4.000E+12 0.00 57430.0 !  
Yahyaoui  
Ec2h9-1+nc3h7=c8h16-1 8.000E+12 0.00 0.0 !  
Fc4h7-1+pc4h9=c8h16-1 8.000E+12 0.00 0.0 !  
Fc6h11-1+c2h5=c8h16-1 8.000E+12 0.00 0.0 !  
  
Cc8h15-1+h=c8h16-1 1.000E+13 0.00 0.0 !  
Yahyaoui  
  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 2) addition of oh, o  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
  
c8h16-1+oh=ch2o+Ac7h15 1.000E+11 0.00 -4000.0 !  
Westbrook 2009  
c8h16-1+o=ch2hco+Ac6h13 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 5) decomposition by R  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
  
c8h16-1+o2=Cc8h15-1+ho2 4.000E+12 0.00 40000.0 !





1759 CN

Ac9h19h+c9h18-1 1.280E+12 0.22 38372.0 !  
 estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Bc9h19h+c9h18-1 1.950E+15 -0.555 37371.0 !  
 estimated from reverse constant k=4.24E+11.T^0.51.exp(-1230/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Bc9h19h+c9h18-2 2.740E+15 -0.746 36120.0 !  
 estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Cc9h19h+c9h18-2 1.895E+15 -0.705 36028.0 !  
 estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Cc9h19h+c9h18-3 1.080E+15 -0.65 35875.0 !  
 estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Dc9h19h+c9h18-3 1.080E+15 -0.65 35875.0 !  
 estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Dc9h19h+c9h18-4 1.080E+15 -0.65 35875.0 !  
 estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 Ec9h19h+c9h18-4 2.110E+15 -0.64 35872.0 !  
 estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)  
 Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 3) oxydation reactions  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac9h19+o2=c9h18-1+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2575 CN  
 !Bc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2654 CN  
 !Bc9h19+o2=c9h18-1+ho2 8.100E+11 0.00 5000.0 ! OX  
 2655 CN  
 !Cc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2605 CN  
 !Cc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2605 CN  
 !Dc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2605 CN  
 !Dc9h19+o2=c9h18-4+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2605 CN  
 !Ec9h19+o2=c9h18-4+ho2 3.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2604 CN  
 Bc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.900E+12 0.00 5000.0 ! OX  
 2654 CN  
 Bc9h19+o2=c9h18-1+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Fitz 1988  
 Cc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Fitz 1988  
 Cc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Fitz 1988  
 Dc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Fitz 1988  
 Dc9h19+o2=c9h18-4+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Fitz 1988  
 Ec9h19+o2=c9h18-4+ho2 1.800E+10 0.00 -2000.0 !  
 idem sc4h9 Fitz 1988

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! 4) isomerisation  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac9h19=Dc9h19 6.380E-04 4.26 9944.0 !  
 rev / 2.080E-03 4.13 12085.0 /  
 Ac9h19=Ec9h19 2.291E+01 2.82 10757.0 /  
 rev / 2.724E+00 3.16 12849.0 /  
 Bc9h19=Cc9h19 2.951E+00 3.08 11017.0 !  
 rev / 2.951E+00 3.08 11017.0 /  
 Bc9h19=Dc9h19 1.862E+00 3.27 13199.0 !  
 rev / 1.862E+00 3.27 13199.0 /  
 Bc9h19=Ec9h19 1.412E+00 3.32 16146.0 !  
 rev / 2.824E+00 3.32 16146.0 /  
 Cc9h19=Dc9h19 1.412E+00 3.32 16146.0 !  
 rev / 1.412E+00 3.32 16146.0 /

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 5) O2 addition  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac9h19+o2=c9h19qjA 4.820E+36 -8.23 5167.0 !  
 DeSain 2003nc3h7+o2=nc3h7o2  
 !Bc9h19+o2=c9h19qjB 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !Cc9h19+o2=c9h19qjC 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !Dc9h19+o2=c9h19qjD 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2  
 !Ec9h19+o2=c9h19qjE 1.840E+45 -11.10 6538.0 !  
 DeSain 2003ic3h7+o2=ic3h7o2

!Ac9h19+o2=c9h19qjA 9.000E+18 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
 !Bc9h19+o2=c9h19qjB 1.700E+19 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)  
 !Cc9h19+o2=c9h19qjC 1.800E+19 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
 !Dc9h19+o2=c9h19qjD 1.800E+19 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
 !Ec9h19+o2=c9h19qjE 1.800E+19 -2.50 0.0  
 ! Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 6) alkoxy formation  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac9h19+ho2=c9h19ojA+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+ho2=c9h19ojB+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+ho2=c9h19ojC+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+ho2=c9h19ojD+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+ho2=c9h19ojE+oh 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+ch3o2=c9h19ojA+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+ch3o2=c9h19ojB+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002

Cc9h19+ch3o2=c9h19ojC+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+ch3o2=c9h19ojD+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+ch3o2=c9h19ojE+ch3o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+c2h5o2=c9h19ojA+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+c2h5o2=c9h19ojB+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+c2h5o2=c9h19ojC+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+c2h5o2=c9h19ojD+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+c2h5o2=c9h19ojE+c2h5o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+nc3h7o2=c9h19ojA+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+nc3h7o2=c9h19ojB+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+nc3h7o2=c9h19ojC+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+nc3h7o2=c9h19ojD+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+nc3h7o2=c9h19ojE+nc3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+ic3h7o2=c9h19ojA+ic3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+ic3h7o2=c9h19ojB+ic3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+ic3h7o2=c9h19ojC+ic3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+ic3h7o2=c9h19ojD+ic3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+ic3h7o2=c9h19ojE+ic3h7o 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+c9h19qjA=2c9h19ojA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+c9h19qjA=c9h19ojB+c9h19ojA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+c9h19qjA=c9h19ojC+c9h19ojA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+c9h19qjA=c9h19ojD+c9h19ojA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+c9h19qjA=c9h19ojE+c9h19ojA 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+c9h19qjB=c9h19ojA+c9h19ojB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+c9h19qjB=2c9h19ojB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+c9h19qjB=c9h19ojC+c9h19ojB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+c9h19qjB=c9h19ojD+c9h19ojB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+c9h19qjB=c9h19ojE+c9h19ojB 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+c9h19qjC=c9h19ojA+c9h19ojC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002

Bc9h19+c9h19qjC=c9h19ojB+c9h19ojC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+c9h19qjC=2c9h19ojC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+c9h19qjC=c9h19ojD+c9h19ojC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+c9h19qjC=c9h19ojE+c9h19ojC 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+c9h19qjD=c9h19ojA+c9h19ojD 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+c9h19qjD=c9h19ojB+c9h19ojD 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+c9h19qjD=c9h19ojC+c9h19ojD 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+c9h19qjD=2c9h19ojD 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+c9h19qjD=c9h19ojE+c9h19ojD 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ac9h19+c9h19qjE=c9h19ojA+c9h19ojE 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Bc9h19+c9h19qjE=c9h19ojB+c9h19ojE 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Cc9h19+c9h19qjE=c9h19ojC+c9h19ojE 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Dc9h19+c9h19qjE=c9h19ojD+c9h19ojE 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 Ec9h19+c9h19qjE=2c9h19ojE 7.000E+12 0.00 -1000.0 !  
 Curran 2002  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! c9h19oj REACTIONS  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! decomposition  
 ! c9h19oj=aldehyde+alkyle  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 c9h19ojA=ch2o+Ac8h17 1.220E+19 -1.68 14690.0 !  
 estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-3457/RT) Curran 2006  
 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 c9h19ojB=ch3hco+Ac7h15 6.400E+10 0.95 10202.0 !  
 estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006  
 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 c9h19ojB=ch3+c7h15hco 2.080E+10 1.06 14206.0 !  
 estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-9043/RT) Curran 2006  
 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 c9h19ojC=cethco+Ac6h13 1.080E+11 0.92 10094.0 !  
 estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006  
 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 c9h19ojC=2h5+c6h13hco 1.640E+13 0.26 9297.0 !  
 estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006  
 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 c9h19ojD=nc3h7+c5h11hco 1.510E+14 -0.09 11001.0 !  
 estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006  
 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 c9h19ojD=nc3h7+hco+Ac5h11 3.960E+14 -0.13 11590.0 !  
 estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006  
 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
 c9h19ojE=pc4h9+nc4h9hco 4.970E+14 -0.12 11232.0 !

estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006  
IJCK vol. 38 pp. 250-275

! c9h19q REACTIONS  
! c9h19q REACTIONS

c9h19qa=oh+c9h19ojA 1.500E+16 0.00 42500.0 !  
Curran  
c9h19qb=oh+c9h19ojB 1.250E+16 0.00 41600.0 !  
Curran  
c9h19qc=oh+c9h19ojC 1.250E+16 0.00 41600.0 !  
Curran  
c9h19qd=oh+c9h19ojD 1.250E+16 0.00 41600.0 !  
Curran  
c9h19qe=oh+c9h19ojE 1.250E+16 0.00 41600.0 !  
Curran

! c9h19qj REACTIONS  
! c9h19qj REACTIONS

! 1) isomerisation to QOOH  
! 2) dismutations with ho2  
! ROOH formation  
! \*\*\*\*\*

! 1) isomerisation to QOOH  
! \*\*\*\*\*

c9h19qja=c9h18rBqA 3.300E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjb=c9h18rCqA 5.700E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjc=c9h18rDqA 9.900E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjd=c9h18rEqA 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qjb=c9h18rAgB 5.000E+09 1.00 35500.0 !  
5-member ring, 3 primary H atoms  
c9h19qjb=c9h18rCqB 3.300E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjb=c9h18rDqB 5.700E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjb=c9h18rEqB 9.900E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjb=c9h18rFqB 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qjc=c9h18rAgC 8.600E+08 1.00 28000.0 !  
6-member ring, 3 primary H atoms  
c9h19qjc=c9h18rBqC 3.300E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjc=c9h18rDqC 3.300E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjc=c9h18rEqC 5.700E+08 1.00 25000.0 !

6-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjC=c9h18rFqC 9.900E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjC=c9h18rGqC 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qjd=c9h18rAgD 1.500E+08 1.00 25000.0 !  
7-member ring, 3 primary H atoms  
c9h19qjd=c9h18rBqD 5.700E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjd=c9h18rCqD 3.300E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjd=c9h18rEqD 3.300E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjd=c9h18rFqD 5.700E+08 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjd=c9h18rGqD 9.900E+07 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 2 secondary H atoms  
c9h19qjd=c9h18rHqD 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
8-member ring, 2 secondary H atoms

c9h19qje=c9h18rAgE 5.100E+07 1.00 24000.0 !  
8-member ring, 6 primary H atoms  
c9h19qje=c9h18rBqE 2.000E+08 1.00 22000.0 !  
7-member ring, 4 secondary H atoms  
c9h19qje=c9h18rCqE 1.100E+09 1.00 25000.0 !  
6-member ring, 4 secondary H atoms  
c9h19qje=c9h18rDqE 6.700E+09 1.00 32500.0 !  
5-member ring, 4 secondary H atoms

! 1) isomerisation to QOOH  
! 2) dismutations with ho2  
! ROOH formation  
! \*\*\*\*\*

c9h19qja+h2o2=c9h19qa+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran  
c9h19qjd+h2o2=c9h19qb+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran  
c9h19qje+h2o2=c9h19qc+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran  
c9h19qjc+h2o2=c9h19qd+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran  
c9h19qjd+h2o2=c9h19qe+o2 2.900E+11 0.00 1550.0 !  
idem ch3o2 Raventos-Duran

c9h19qja+h2o2=c9h19qa+ho2 2.400E+12 0.00 10000.0 !  
Ribaucour  
c9h19qjb+h2o2=c9h19qb+ho2 2.400E+12 0.00 10000.0 !  
Ribaucour  
c9h19qjc+h2o2=c9h19qc+ho2 2.400E+12 0.00 10000.0 !  
Ribaucour  
c9h19qjd+h2o2=c9h19qd+ho2 2.400E+12 0.00 10000.0 !  
Ribaucour  
c9h19qje+h2o2=c9h19qe+ho2 2.400E+12 0.00 10000.0 !  
Ribaucour

c9h19qja+h2o2=c9h19ojA+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
c9h19qjb+h2o2=c9h19ojB+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
c9h19qjc+h2o2=c9h19ojC+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
c9h19qjd+h2o2=c9h19ojD+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0  
c9h19qje+h2o2=c9h19ojE+oh+o2 1.000E+11 0.00 0.0

c9h19qja+ch3o2=c9h19ojA+ch3o+o2 1.400E+16 -1.61 1860.0 !

Westbrook 2009  
c9h19qjb+ch3o2=c9h19ojB+ch3o+o2 1.400E+16 -1.61 1860.0 !  
Westbrook 2009  
c9h19qjc+ch3o2=c9h19ojC+ch3o+o2 1.400E+16 -1.61 1860.0 !  
Westbrook 2009  
c9h19qjd+ch3o2=c9h19ojD+ch3o+o2 1.400E+16 -1.61 1860.0 !  
Westbrook 2009  
c9h19qje+ch3o2=c9h19ojE+ch3o+o2 1.400E+16 -1.61 1860.0 !  
Westbrook 2009

c9h19qja+c9h19qja=c9h19ojA+c9h19ojA+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qja+c9h19qjb=c9h19ojA+c9h19ojB+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qja+c9h19qjc=c9h19ojA+c9h19ojC+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qja+c9h19qjd=c9h19ojA+c9h19ojD+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qja+c9h19qje=c9h19ojA+c9h19ojE+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjb+c9h19qjb=c9h19ojB+c9h19ojB+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjb+c9h19qjc=c9h19ojB+c9h19ojC+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjb+c9h19qjd=c9h19ojB+c9h19ojD+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjb+c9h19qje=c9h19ojB+c9h19ojE+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjc+c9h19qjc=c9h19ojC+c9h19ojC+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjc+c9h19qjd=c9h19ojC+c9h19ojD+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjc+c9h19qje=c9h19ojC+c9h19ojE+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjd+c9h19qjd=c9h19ojD+c9h19ojD+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qjd+c9h19qje=c9h19ojD+c9h19ojE+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009  
c9h19qje+c9h19qje=c9h19ojE+c9h19ojE+o2 1.400E+16 -1.61  
1860.0 ! Westbrook 2009

! c9h18rXqj REACTIONS  
! c9h18rXqj REACTIONS

! 1) isomerisation  
! 2) addition to o2  
! 3) c-o and c-c breaking  
! 4) o-o breaking  
! 5) o-rings formation  
! 6) c-o breaking  
! 7) c-c breaking  
! 8) c-h breaking  
! 9) oxidation  
! \*\*\*\*\*

! 3) o-o and c-c breaking  
! \*\*\*\*\*

! c9h18rYqX+o2=c9h18qjYqX  
! \*\*\*\*\*

c9h18rEqA+o2=c9h18qjBqA 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)  
c9h18rEqA+o2=c9h18qjCqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rEqA+o2=c9h18qjDqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rEqA+o2=c9h18qjEqA 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c9h18rAgB+o2=c9h18qjAgB 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
c9h18rCqB+o2=c9h18qjCqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rDqB+o2=c9h18qjDqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rEqB+o2=c9h18qjEqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rFqB+o2=c9h18qjFqB 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c9h18rAgC+o2=c9h18qjAgC 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
c9h18rBqC+o2=c9h18qjBqC 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)  
c9h18rDqC+o2=c9h18qjDqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rEqC+o2=c9h18qjEqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rFqC+o2=c9h18qjFqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rGqC+o2=c9h18qjGqC 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c9h18rAgD+o2=c9h18qjAgD 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
c9h18rBqD+o2=c9h18qjBqD 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)  
c9h18rCqD+o2=c9h18qjCqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rDqD+o2=c9h18qjDqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rEqD+o2=c9h18qjEqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rFqD+o2=c9h18qjFqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rGqD+o2=c9h18qjGqD 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

c9h18rAgE+o2=c9h18qjAgE 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
c9h18rBqE+o2=c9h18qjBqE 1.700E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)  
c9h18rCqE+o2=c9h18qjCqE 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)  
c9h18rDqE+o2=c9h18qjDqE 1.800E+19 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

! 3) o-o and c-c breaking  
! \*\*\*\*\*

! c9h18rAgC=>oh+c2h4+c6h13hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
! c9h18rCqA=>oh+ch2o+c8h16-1 5.000E+13 0.00 25500.0 !

!c9h18rBqD=>oh+c3h6+c5h11hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
!c9h18rDqB=>oh+c3h3co+c7h14-1 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
!c9h18rCqE=>oh+c4h8+nc4h9hco 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
!c9h18rEqC=>oh+ethco+c6h12-1 5.000E+13 0.00 25500.0 !  
  
c9h18rCqA=>oh+c2h2+c8h16-1 1.680E+15 -0.24 29180.0 !  
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
c9h18rDqB=>oh+c3h3co+c7h14-1 3.090E+17 -0.93 29019.0 !  
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
c9h18rAqC=>oh+c2h4+c6h13hco 4.010E+15 -0.425 28648.0 !  
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=1.3E+04.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
c9h18rEqC=>oh+ethco+c6h12-1 1.090E+17 -0.78 28379.0 !  
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
c9h18rBqD=>oh+c3h6+c5h11hco 5.960E+14 -0.09 27833.0 !  
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
c9h18rFqD=>oh+c5h10+nc3h7hco 3.110E+16 -0.615 28187.0 !  
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
c9h18rCqE=>oh+c4h8+nc4h9hco 7.250E+15 -0.415 27996.0 !  
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275  
  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 5) c-rings formation  
! (o-c breaking)  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
  
!c9h18rBqA=>oh+c9h18o-AB 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
!c9h18rCqA=>oh+c9h18o-AC 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
!c9h18rDqA=>oh+c9h18o-AD 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
!c9h18rEqA=>oh+c9h18o-AE 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
  
!c9h18rAqB=>oh+c9h18o-AB 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
!c9h18rCqB=>oh+c9h18o-BC 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
!c9h18rDqB=>oh+c9h18o-BD 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
!c9h18rEqB=>oh+c9h18o-BE 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
!c9h18rFqB=>oh+c9h18o-BF 2.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
  
!c9h18rAqC=>oh+c9h18o-AC 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3

!c9h18rBqC=>oh+c9h18o-BC 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
!c9h18rDqC=>oh+c9h18o-CD 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
!c9h18rEqC=>oh+c9h18o-CE 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
!c9h18rFqC=>oh+c9h18o-CF 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
!c9h18rGqC=>oh+c9h18o-CG 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
  
!c9h18rAqD=>oh+c9h18o-AD 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
!c9h18rBqD=>oh+c9h18o-BD 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
!c9h18rCqD=>oh+c9h18o-CD 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
!c9h18rEqD=>oh+c9h18o-DE 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
!c9h18rFqD=>oh+c9h18o-DF 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
!c9h18rGqD=>oh+c9h18o-CF 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
!c9h18rHqD=>oh+c9h18o-BF 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
  
!c9h18rAqE=>oh+c9h18o-AE 1.500E+08 0.00 1800.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 8  
!c9h18rBqE=>oh+c9h18o-BE 2.100E+08 0.00 6500.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol  
!c9h18rCqE=>oh+c9h18o-CE 2.500E+10 0.00 15250.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 3  
!c9h18rDqE=>oh+c9h18o-DE 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
  
c9h18rBqA=>oh+c9h18o-AB 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c9h18rCqA=>oh+c9h18o-AC 9.100E+10 0.00 16600.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
c9h18rDqA=>oh+c9h18o-AD 3.600E+09 0.00 7000.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
c9h18rEqA=>oh+c9h18o-AE 1.700E+08 0.00 1950.0 !  
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
  
c9h18rAqB=>oh+c9h18o-AB 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2

c9h18rCqB=>oh+c9h18o-BC 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c9h18rDqB=>oh+c9h18o-BD 9.100E+10 0.00 16600.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
c9h18rEqB=>oh+c9h18o-BE 3.600E+09 0.00 7000.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
c9h18rFqB=>oh+c9h18o-BF 1.700E+08 0.00 1950.0 !  
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
  
c9h18rAqC=>oh+c9h18o-AC 9.100E+10 0.00 16600.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
c9h18rBqC=>oh+c9h18o-BC 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c9h18rDqC=>oh+c9h18o-CD 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c9h18rEqC=>oh+c9h18o-CE 9.100E+10 0.00 16600.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
c9h18rFqC=>oh+c9h18o-CF 3.600E+09 0.00 7000.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
c9h18rGqC=>oh+c9h18o-CG 1.700E+08 0.00 1950.0 !  
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
  
c9h18rAqD=>oh+c9h18o-AD 3.600E+09 0.00 7000.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
c9h18rBqD=>oh+c9h18o-BD 9.100E+10 0.00 16600.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
c9h18rCqD=>oh+c9h18o-CD 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c9h18rEqD=>oh+c9h18o-DE 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
c9h18rFqD=>oh+c9h18o-DF 9.100E+10 0.00 16600.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
c9h18rGqD=>oh+c9h18o-CF 3.600E+09 0.00 7000.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
c9h18rHqD=>oh+c9h18o-BF 1.700E+08 0.00 1950.0 !  
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
  
c9h18rAqE=>oh+c9h18o-AE 1.700E+08 0.00 1950.0 !  
Battin-Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
c9h18rBqE=>oh+c9h18o-BE 3.600E+09 0.00 7000.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
c9h18rCqE=>oh+c9h18o-CE 9.100E+10 0.00 16600.0 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
c9h18rDqE=>oh+c9h18o-DE 2.950E+11 0.00 22000.0 !  
Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A  
divided by 2  
  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 6) c-o breaking  
! alkene formation  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
  
ho2+c9h18-1=c9h18rAqB Curran 1.500E+11 0.00 7800.0 !  
Curran  
ho2+c9h18-1=c9h18rBqA Curran 1.500E+11 0.00 7800.0 !  
Curran  
ho2+c9h18-2=c9h18rBqC Curran 1.500E+11 0.00 7800.0 !  
Curran

ho2+c9h18-2=c9h18rCqB Curran 1.500E+11 0.00 7800.0 !  
Curran  
ho2+c9h18-3=c9h18rCqD Curran 1.500E+11 0.00 7800.0 !  
Curran  
ho2+c9h18-4=c9h18rEqD Curran 1.500E+11 0.00 7800.0 !  
Curran  
ho2+c9h18-4=c9h18rDqE Curran 1.500E+11 0.00 7800.0 !  
Curran  
  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! c9h18rAqB REACTIONS  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
  
!\*\*\*\*\*  
! ketohydroperoxides formation  
!\*\*\*\*\*  
  
!c9h18rBqA=>oh+c9h17oAgB 3.350E+09 1.00 32500.0 !  
! 5-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol  
!c9h18rCqA=>oh+c9h17oAgC 5.750E+08 1.00 25000.0 !  
! 6-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol  
!c9h18rDqA=>oh+c9h17oAgD 9.890E+07 1.00 22000.0 !  
! 7-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol  
!c9h18rEqA=>oh+c9h17oAgE 1.700E+07 1.00 21000.0 !  
! 8-member ring, 2 primary H atoms E-3000cal/mol  
  
!c9h18rAqB=>oh+c9h17oBgA 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rCqB=>oh+c9h17oBgC 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rDqB=>oh+c9h17oBgD 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rEqB=>oh+c9h17oBgE 4.945E+07 1.00 19000.0 !  
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rFqB=>oh+c9h17oBgF 8.495E+06 1.00 18000.0 !  
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
  
!c9h18rAqC=>oh+c9h17oCqA 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rBqC=>oh+c9h17oCqB 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rCqC=>oh+c9h17oCqD 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rDqC=>oh+c9h17oCqE 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rEqC=>oh+c9h17oCqF 4.945E+07 1.00 19000.0 !  
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rFqC=>oh+c9h17oCqG 8.495E+06 1.00 18000.0 !  
! 8-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
  
!c9h18rAqD=>oh+c9h17oDqA 4.945E+07 1.00 19000.0 !  
! 7-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rBqD=>oh+c9h17oDqB 2.875E+08 1.00 22000.0 !  
! 6-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rCqD=>oh+c9h17oDqC 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rDqD=>oh+c9h17oDqE 1.675E+09 1.00 29500.0 !  
! 5-member ring, 1 secondary H atom E-3000cal/mol  
!c9h18rEqD=>oh+c9h17oDqF 2.875E+08 1.00 22000.0 !





!c9h18o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc3h7coch2 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
!c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7coch2 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AE+h=>h2+c6h12-1+ch2ch2hco 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c9h18o-AE+oh=>h2o+c6h12-1+ch2ch2hco 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch2ch2hco 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-AE+h=>h2+c2h4+nc4h9coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c9h18o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc4h9coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc4h9coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BF+h=>h2+c5h10+ch3coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c9h18o-BF+oh=>h2o+c5h10+ch3coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c5h10+ch3coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-BF+h=>h2+c3h6+nc3h7coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c9h18o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc3h7coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc3h7coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CG+h=>h2+c4h8+c2h5coc2h4p 4.800E+08 1.50 2005.0 !  
c9h18o-CG+oh=>h2o+c4h8+c2h5coc2h4p 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c9h18o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5coc2h4p 2.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CF+h=>h2+c2h5coc6h12-4 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c9h18o-CF+oh=>h2o+c2h5coc6h12-4 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c2h5coc6h12-4 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c9h18o-CF+h=>h2+c3h7coc5h10-3 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c9h18o-CF+oh=>h2o+c3h7coc5h10-3 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c3h7coc5h10-3 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Conn. & Flame vol. 129 pp.365-377

c2h5coc6h12-4=c5h10+c2h5coc2h4p 2.000E+13 0.00 28700.0  
c2h5coc6h12-4+o2=non3\*o6oo 1.800E+19 -2.50 0.0  
non3\*o6oo=non3\*o4j6oooh 5.750E+08 1.00 22000.0  
non3\*o4j6oooh+o2=non3\*o4oo6oooh 1.200E+10 0.00 -2300.0  
non3\*o4oo6oooh+non3\*o6\*o4oooh 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
E-2000  
non3\*o6\*o4oooh+oh+c2h5coc6ald3oxo 1.500E+16 0.00 44500.0

c3h7coc5h10-3=c4h8+nc3h7coch2 2.000E+13 0.00 28700.0  
c3h7coc5h10-3+o2=non4\*o7oo 1.800E+19 -2.50 0.0  
non4\*o7oo=non4\*o5j7oooh 5.750E+08 1.00 22000.0  
non4\*o5j7oooh+o2=non4\*o5oo7oooh 1.200E+10 0.00 -2300.0  
non4\*o5oo7oooh+oh+non4\*o7\*o5oooh 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
E-2000  
non4\*o7\*o5oooh+oh+c3h7coc5ald3oxo 1.500E+16 0.00 44500.0

!#####  
!#####  
! c9h18 REACTIONS  
!#####  
!#####

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

! 5) decomposition by R  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!#####  
! 1) addition of H and CH3  
! 2) addition of OH  
! 3) addition of O  
! 4) addition of ho2  
! 5) decomposition by R  
!#####

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 1) addition of H and CH3  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h18-1+ch3=Ac7h15+c3h6 9.600E+10 0.00 8000.0 ! ROL  
5188

!#####  
! 2) addition of OH  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c9h18-1+oh=ch3+c7h15hco 1.000E+12 0.00 0.0  
! c9h18-1+oh=ch2o+Ac8h17 1.000E+11 0.00 -4000.0  
! Westbrook 2009

c9h18-2+oh=c2h5+c6h13hco 1.000E+12 0.00 0.0 !  
c9h18-2+oh=c3h3co+Ac7h15 1.000E+12 0.00 0.0 !

c9h18-3+oh=nc3h7+c5h11hco 1.000E+12 0.00 0.0 !  
c9h18-3+oh=ethco+Ac6h13 1.000E+12 0.00 0.0 !

c9h18-4+oh=pc4h9+nc4h9hco 1.000E+12 0.00 0.0 !  
c9h18-4+oh=nc3h7hco+Ac5h11 1.000E+12 0.00 0.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 3) addition of o  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h18-1+o=ch2o+c8h16-1 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
c9h18-2+o=ch3hco+c7h14-1 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
c9h18-2+o=c2h4+c6h13hco 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
c9h18-3+o=ethco+c6h12-1 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
c9h18-3+o=c3h6+c5h11hco 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
c9h18-4+o=nc3h7hco+c5h10 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009  
c9h18-4+o=c4h8+nc4h9hco 1.000E+11 0.00 -1050.0 !  
Westbrook 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
! 5) decomposition by R  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c9h18-1+h=h2+Cc9h17-1 6.550E+12 0.00 4445.0 !  
idem 1-hexene  
c9h18-1+oh=h2o+Cc9h17-1 4.186E+06 2.00 -543.0 !

idem c4h8  
c9h18-1+ho2=h2o2+Cc9h17-1 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c9h18-1+ch3=ch4+Cc9h17-1 2.000E+11 0.00 6800.0 !  
idem 1-hexene  
c9h18-1+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-1+c2h5=c2h6+Cc9h17-1 1.000E+11 0.00 8300.0 !  
idem 1-hexene  
c9h18-1+oh=Cc9h17-1 4.000E+13 0.00 4000.0 !  
idem 1-hexene  
c9h18-1+nc3h7=c3h8+Cc9h17-1 1.000E+11 0.00 8300.0 !  
idem 1-hexene  
c9h18-1+c2h3=c2h4+Cc9h17-1 2.000E+11 0.00 6800.0 !  
idem 1-hexene  
c9h18-1+oh=h2o+c5h8-14+pc4h9 1.125E+06 2.00 -1391.0 !  
idem n-alkanes  
c9h18-1+oh=h2o+c6h12-1+ac3h5 1.125E+06 2.00 -1391.0 !  
idem n-alkanes  
c9h18-1+oh=h2o+c5h10+Dc4h7-1 1.125E+06 2.00 -1391.0 !  
idem n-alkanes  
c9h18-1+oh=h2o+c4h8+Ec5h9-1 1.125E+06 2.00 -1391.0 !  
idem n-alkanes  
c9h18-1+oh=h2o+c3h6+Fc6h11-1 1.000E+06 2.00 -597.0 !  
idem n-alkanes

c9h18-2+h=h2+Cc9h17-1 1.700E+05 2.50 2490.0 !  
c9h18-2+oh=h2o+Cc9h17-1 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c9h18-2+ho2=h2o2+Cc9h17-1 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c9h18-2+ch3=ch4+Cc9h17-1 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-2+c2h5=c2h6+Cc9h17-1 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c9h18-2+o=oh+Cc9h17-1 6.000E+10 0.70 7682.0 !

c9h18-2+h=h2+Dc9h17-2 1.700E+05 2.50 2490.0 !  
c9h18-2+oh=h2o+Dc9h17-2 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c9h18-2+ho2=h2o2+Dc9h17-2 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c9h18-2+ch3=ch4+Dc9h17-2 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-2+c2h5=c2h6+Dc9h17-2 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c9h18-2+o=oh+Dc9h17-2 6.000E+10 0.70 7682.0 !

c9h18-3+h=h2+Dc9h17-2 1.700E+05 2.50 2490.0 !  
c9h18-3+oh=h2o+Dc9h17-2 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c9h18-3+ho2=h2o2+Dc9h17-2 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c9h18-3+ch3=ch4+Dc9h17-2 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-3+c2h5=c2h6+Dc9h17-2 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c9h18-3+o=oh+Dc9h17-2 6.000E+10 0.70 7682.0 !

c9h18-3+h=h2+Ec9h17-3 1.700E+05 2.50 2490.0 !  
c9h18-3+oh=h2o+Ec9h17-3 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c9h18-3+ho2=h2o2+Ec9h17-3 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c9h18-3+ch3=ch4+Ec9h17-3 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-3+c2h5=c2h6+Ec9h17-3 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c9h18-3+o=oh+Ec9h17-3 6.000E+10 0.70 7682.0 !

c9h18-4+h=h2+Ec9h17-3 1.700E+05 2.50 2490.0 !

c9h18-4+oh=h2o+Ec9h17-3 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c9h18-4+ho2=h2o2+Ec9h17-3 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c9h18-4+ch3=ch4+Ec9h17-3 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-4+c2h5=c2h6+Ec9h17-3 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c9h18-4+o=oh+Ec9h17-3 6.000E+10 0.70 7682.0 !

c9h18-4+h=h2+Fc9h17-4 1.700E+05 2.50 2490.0 !  
c9h18-4+oh=h2o+Fc9h17-4 3.100E+06 2.00 -300.0 !  
c9h18-4+ho2=h2o2+Fc9h17-4 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott and Walker 2002  
c9h18-4+ch3=ch4+Fc9h17-4 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Fc9h17-4 2.200E+00 3.50 5675.0 !  
c9h18-4+c2h5=c2h6+Fc9h17-4 2.200E+00 3.50 6835.0 !  
c9h18-4+o=oh+Fc9h17-4 6.000E+10 0.70 7682.0 !

Cc9h17-1=c4h6+Ac5h11 1.339E+15 -0.52 38320.0 !  
Curran  
Cc9h17-1+h=Cc9h18-1 1.000E+13 0.00 0.0 !  
Cc9h17-1+ho2=oh+acrol+Ac6h13 1.000E+12 0.00 8000.0 !

Dc9h17-2=c5h8-13+pc4h9 2.500E+13 0.00 35000.0 !  
Ec9h17-3=c6h10-13+nc3h7 2.500E+13 0.00 35000.0 !  
Fc9h17-4=c7h12-13+c2h5 2.500E+13 0.00 35000.0 !

!#####  
!#####  
! c9h18 REACTIONS  
!#####  
!#####

Dc4h7-1+Ec5h9-1=c9h16 1.000E+13 0.00 0.0 !  
TER 5473

!#####  
!#####  
! nonanal REACTIONS  
!#####

c8h17hco+h=h2+c8h17co 4.000E+13 0.00 4200.0 !  
ALD 5362  
c8h17hco+oh=h2o+c8h17co 4.200E+12 0.00 500.0 !  
ALD 5363  
c8h17hco+ho2=h2o2+c8h17co 1.000E+12 0.00 10000.0 !  
ALD 5364  
c8h17hco+ch3=ch4+c8h17co 2.000E-06 5.60 2500.0 !  
ALD 5365  
c8h17hco+c2h5=c2h6+c8h17co 1.300E+12 0.00 8500.0 !  
ALD 5366

c8h17co=>co+Ac8h17 2.000E+13 0.00 28700.0 !  
COR 5378  
c8h17co+ho2=>co2+oh+Ac8h17 2.000E+13 0.00 0.0 !

!#####  
!#####  
! nonanone REACTIONS  
!#####

nonanone+h=>h2+ch2co+ch3+3c2h4 2.700E+07 2.00 5000.0 !



nc10h22+ch2hco=ch3hco+Dc10h21 mE 3005 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Cc10h21 ! mE 3054 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ecl10h21 mE 3006 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Bc10h21 ! mE 3055 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+ch3co=ch3hco+Ac10h21 mE 3007 CR	3.000E+11	0.00	15000.0	!	nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ecl10h21 ! mE 3056 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+ch3co=ch3hco+Bc10h21 mE 3008 CR	2.000E+11	0.00	12700.0	!	nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ac10h21 mE 3057 CR	6.000E+11	0.00	13700.0	!
nc10h22+ch3co=ch3hco+Cc10h21 mE 3009 CR	2.000E+11	0.00	12700.0	!	nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Bc10h21 mE 3058 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+ch3co=ch3hco+Dc10h21 mE 3010 CR	2.000E+11	0.00	12700.0	!	nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Cc10h21 mE 3059 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+ch3co=ch3hco+Ecl10h21 mE 3011 CR	2.000E+11	0.00	12700.0	!	nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Dc10h21 mE 3060 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+nc3h7=c3h8+Ac10h21 mE 3032 CR	6.000E+11	0.00	13700.0	!	nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ecl10h21 mE 3061 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+nc3h7=c3h8+Bc10h21 mE 3033 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ac10h21 mE 3062 CR	6.000E+11	0.00	13700.0	!
nc10h22+nc3h7=c3h8+Cc10h21 mE 3034 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Bc10h21 mE 3063 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+nc3h7=c3h8+Dc10h21 mE 3035 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Cc10h21 mE 3064 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+nc3h7=c3h8+Ecl10h21 mE 3036 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Dc10h21 mE 3065 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+pc4h9=c4h10+Ac10h21 mE 3037 CR	6.000E+11	0.00	13700.0	!	nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ecl10h21 mE 3066 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!
nc10h22+pc4h9=c4h10+Bc10h21 mE 3038 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ac10h21 mE 3382 CR	6.000E+11	0.00	14700.0	!
nc10h22+pc4h9=c4h10+Cc10h21 mE 3039 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Bc10h21 mE 3383 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+pc4h9=c4h10+Dc10h21 mE 3040 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Cc10h21 mE 3384 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+pc4h9=c4h10+Ecl10h21 mE 3041 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Dc10h21 mE 3385 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ac10h21 ! mE 3042 CR	6.000E+11	0.00	13700.0	!	nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ecl10h21 mE 3386 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Bc10h21 ! mE 3043 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ac10h21 mE 3177 CR	6.000E+11	0.00	14700.0	!
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Cc10h21 ! mE 3044 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Bc10h21 mE 3178 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Dc10h21 ! mE 3045 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Cc10h21 mE 3179 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ecl10h21 ! mE 3046 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Dc10h21 mE 3180 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ac10h21 mE 3047 CR	6.000E+11	0.00	13700.0	!	nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ecl10h21 mE 3181 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Bc10h21 mE 3048 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ac10h21 mE 3167 CR	6.000E+11	0.00	14700.0	!
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Cc10h21 mE 3049 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Bc10h21 mE 3168 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Dc10h21 mE 3050 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Cc10h21 mE 3169 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ecl10h21 mE 3051 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Dc10h21 mE 3170 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ac10h21 ! mE 3052 CR	6.000E+11	0.00	13700.0	!	nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ecl10h21 mE 3171 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!
nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Bc10h21 ! mE 3053 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ac10h21 mE 3172 CR	6.000E+11	0.00	14700.0	!

nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Bc10h21 mE 3173 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	mE 3196 CN				
nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Cc10h21 mE 3174 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ac10h21 mE 3197 CN	1.200E+13	0.00	20000.0	!
nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Dc10h21 mE 3175 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Bc10h21 mE 3198 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ecl10h21 mE 3176 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Cc10h21 mE 3199 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Bc10h21 mE 3067 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Dc10h21 mE 3200 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Cc10h21 mE 3068 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ecl10h21 mE 3201 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Dc10h21 mE 3069 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ac10h21 mE 3202 CN	1.200E+13	0.00	20000.0	!
nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Ecl10h21 mE 3070 CR	4.000E+11	0.00	11400.0	!	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Bc10h21 mE 3203 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Cc10h21 mE 3072 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Cc10h21 mE 3204 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Dc10h21 mE 3073 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Dc10h21 mE 3205 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Ecl10h21 mE 3074 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ecl10h21 mE 3206 CN	6.000E+12	0.00	17500.0	!
nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Dc10h21 mE 3077 CR	4.000E+11	0.00	12400.0	!	nc10h22+o2cho=Ac10h21+ho2cho Curran et al c7 mechanism release may 2004	1.680E+13	0.00	20440.0	!
nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Ecl10h21 mE 3078 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	nc10h22+o2cho=Bc10h21+ho2cho Curran et al c7 mechanism release may 2004	1.120E+13	0.00	17690.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ac10h21 mE 3082 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	nc10h22+o2cho=Cc10h21+ho2cho Curran et al c7 mechanism release may 2004	1.120E+13	0.00	17690.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Bc10h21 mE 3083 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	nc10h22+o2cho=Dc10h21+ho2cho Curran et al c7 mechanism release may 2004	1.120E+13	0.00	17690.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Cc10h21 mE 3084 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	nc10h22+o2cho=Ecl10h21+ho2cho Curran et al c7 mechanism release may 2004	1.120E+13	0.00	17690.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Dc10h21 mE 3085 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	! c10h21 REACTIONS ! ***** ! *****				
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ecl10h21 mE 3086 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	! ***** ! 1) C-C bond scission ! 2) C-h bond scission : alkene formation ! 3) oxydation reactions ! 4) decomposition by o, oh and ho2 attack ! 5) isomerisation ! 6) O2 addition ! 7) alkoxy formation ! *****				
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Bc10h21 mE 3087 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	!!!!!! ! 1) C-C bond scission ! *****				
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Cc10h21 mE 3088 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	!Ac10h21=Ac8h17+c2h4 ! DE 1707 CW	2.000E+13	0.00	28700.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Dc10h21 mE 3089 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	!Bc10h21=Ac7h15+c3h6 ! DE 1709 CW	2.000E+13	0.00	28700.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ecl10h21 mE 3090 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	!Cc10h21=Ac6h13+c4h8 ! DE 1712 CW	2.000E+13	0.00	28700.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Bc10h21 mE 3091 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	!C10h21=c3h3+c9h18-1 ! DE 1713 CN	2.000E+13	0.00	31000.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Cc10h21 mE 3092 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	!Dc10h21=Ac5h11+c5h10 ! DE 1716 CW	2.000E+13	0.00	28700.0	!
nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Dc10h21 mE 3093 CR	rev / 4.000E+11 4.000E+11	0.00	12400.0/ 12400.0	!	!Dc10h21=c2h5+c8h16-1	2.000E+13	0.00	28700.0	!

```

! DE 1717 CW
!Ec10h21=pc4h9+c6h12-1      2.000E+13      0.00      28700.0
! DE 1720 CW
!Ec10h21=nc3h7+c7h14-1      2.000E+13      0.00      28700.0
! DE 1721 CW

Ac10h21=Ac8h17+c2h4          9.120E+11      0.31      27240.5 !
Tsang et al 2009
Bc10h21=Ac7h15+c3h6          6.025E+10      0.84      27822.8 !
Tsang et al 2009
Cc10h21=Ac6h13+c4h8          2.041E+13      0.04      28496.5 !
Tsang et al 2009
Cc10h21=ch3+c9h18-1          9.550E+09      1.08      29390.7 !
Tsang et al 2009
Dc10h21=Ac5h11+c5h10        2.041E+13      0.04      28496.5 !
Tsang et al 2009
Dc10h21=c2h5+c8h16-1        8.510E+09      1.11      27025.9 !
Tsang et al 2009
Ec10h21=pc4h9+c6h12-1        2.041E+13      0.04      28496.5 !
Tsang et al 2009
Ec10h21=nc3h7+c7h14-1        5.495E+11      0.55      28087.1 !
Tsang et al 2009

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) C-h bond scission
! c10h21=h+c10h20
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21=h+c10h20-1            1.990E+13      -0.02      35861.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Bc10h21=h+c10h20-1            7.730E+12      0.19      36548.0 !
estimated from reverse constant k=4.24E+11.T^0.51.exp(-1230/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc10h21=h+c10h20-2            1.080E+13      0.00      35288.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc10h21=h+c10h20-2            7.470E+12      0.04      35206.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Cc10h21=h+c10h20-3            4.030E+12      0.10      35036.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Dc10h21=h+c10h20-3            4.030E+12      0.10      35039.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Dc10h21=h+c10h20-4            4.020E+12      0.10      35037.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Ec10h21=h+c10h20-4            4.020E+12      0.10      35037.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
Ec10h21=h+c10h20-5            2.190E+12      0.095     35055.0 !
estimated from reverse constant k=2.5E+11.T^0.51.exp(-2620/RT)
Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) oxydation reactions
! c10h21+o2=c10h20+ho2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21+o2=c10h20-1+ho2      1.900E+12      0.00      5000.0 !
OX 2576 CN

```

```

Bc10h21+o2=c10h20-1+ho2      8.000E+09      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Bc10h21+o2=c10h20-2+ho2      1.800E+10      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc10h21+o2=c10h20-2+ho2      1.800E+10      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Cc10h21+o2=c10h20-3+ho2      1.800E+10      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Dc10h21+o2=c10h20-3+ho2      1.800E+10      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Dc10h21+o2=c10h20-4+ho2      1.800E+10      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Ec10h21+o2=c10h20-4+ho2      1.800E+10      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988
Ec10h21+o2=c10h20-5+ho2      1.800E+10      0.00     -2000.0 !
idem sc4h9 Pitz 1988

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 4) decomposition by o, oh
! and ho2 attack
! c10h21+o=alkyl+aldehyde
! c10h21+oh=alkane+aldehyde
! c10h21+ho2=>alkyl+aldehyde+oh
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21+o=ch2o+Ac9h19        2.000E+13      0.00     4000.0 !
Bc10h21+o=ch3hco+Ac8h17      2.000E+13      0.00     4000.0 !
Cc10h21+o=c2h5+c8h17hco      2.000E+13      0.00     4000.0 !
Cc10h21+o=ethco+Ac7h15      2.000E+13      0.00     4000.0 !
Cc10h21+o=c2h5+c7h15hco      2.000E+13      0.00     4000.0 !
Dc10h21+o=nc3h7+c6h13hco     2.000E+13      0.00     4000.0 !
Dc10h21+o=nc3h7hco+Ac6h13    2.000E+13      0.00     4000.0 !
Ec10h21+o=pc4h9+c5h11hco     2.000E+13      0.00     4000.0 !
Ec10h21+o=nc4h9hco+Ac5h11    2.000E+13      0.00     4000.0 !

Ac10h21+oh=ch2o+nc9h20       2.000E+13      0.00     4000.0 !
Bc10h21+oh=ch3hco+nc8h18     2.000E+13      0.00     4000.0 !
Bc10h21+oh=ch4+c8h17hco      2.000E+13      0.00     4000.0 !
Cc10h21+oh=ethco+nc7h16      2.000E+13      0.00     4000.0 !
Cc10h21+oh=c2h6+c7h15hco     2.000E+13      0.00     4000.0 !
Dc10h21+oh=c3h8+c6h13hco     2.000E+13      0.00     4000.0 !
Dc10h21+oh=nc3h7hco+Ac6h14   2.000E+13      0.00     4000.0 !
Ec10h21+oh=c4h10+c5h11hco    2.000E+13      0.00     4000.0 !
Ec10h21+oh=nc4h9hco+nc5h12   2.000E+13      0.00     4000.0 !

Ac10h21+ho2=ch2o+Ac9h19+oh   5.000E+12      0.00      0.0 !
Bc10h21+ho2=ch3hco+Ac8h17+oh 5.000E+12      0.00      0.0 !
Cc10h21+ho2=ch3+c8h17hco+oh  5.000E+12      0.00      0.0 !
Cc10h21+ho2=ethco+Ac7h15+oh  5.000E+12      0.00      0.0 !
Cc10h21+ho2=c2h5+c7h15hco+oh 5.000E+12      0.00      0.0 !
Dc10h21+ho2=nc3h7+c6h13hco+oh 5.000E+12      0.00      0.0 !
Dc10h21+ho2=nc3h7hco+Ac6h13+oh 5.000E+12      0.00      0.0 !
Ec10h21+ho2=pc4h9+c5h11hco+oh 5.000E+12      0.00      0.0 !
Ec10h21+ho2=nc4h9hco+Ac5h11+oh 5.000E+12      0.00      0.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) isomerisation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac10h21=Cc10h21
!Ac10h21=Dc10h21
rev / 3.030E+09      1.04      38748.6 !
rev / 5.580E+09      0.96      38652.3 /
rev / 5.130E+08      1.04      19047.3 !

```

```

!
!Ac10h21=Ec10h21              rev / 9.450E+08      0.96      18951.0 /
!                               5.900E+07      1.10      13697.1 !
!                               rev / 1.090E+08      1.02      13601.3 /
!
!Bc10h21=Cc10h21              rev / 3.020E+06      1.00      22596.0 !
!                               2.830E+06      1.00      22604.1 /
!Bc10h21=Dc10h21              rev / 6.010E+03      2.07      17926.3 !
!                               5.650E+03      2.08      17935.2 /
!Bc10h21=Ec10h21              rev / 2.390E+04      2.19      12746.8 !
!                               2.240E+04      2.20      12755.0 /
!
!Cc10h21=Dc10h21              rev / 9.890E+07      1.00      13700.0 !
!                               9.890E+07      1.00      13700.0 /
!
!Cc10h21=Ec10h21              rev / 4.070E+08      1.05      18948.1 !
!                               4.070E+08      1.05      18948.1 /
!
!Dc10h21=Ec10h21              rev / 3.350E+09      1.00      38700.0 !
!                               3.350E+09      1.00      38700.0 /

Ac10h21=Dc10h21              5.130E+00      3.23      16849.0 /
Tsang 2008
Ac10h21=Ec10h21              rev / 4.170E-01      3.57      18942.0 !
!                               1.490E+01      2.96      10792.0 !
!                               rev / 4.790E+00      3.14      12956.0 /

Bc10h21=Dc10h21              2.951E+00      3.08      11017.0 !
!                               rev / 2.951E+00      3.08      11017.0 /
Bc10h21=Ec10h21              1.400E-01      3.66      12982.0 !
!                               rev / 1.400E-01      3.66      12982.0 /

Cc10h21=Dc10h21              1.862E+00      3.27      13199.0 !
!                               rev / 1.862E+00      3.27      13199.0 /
Cc10h21=Ec10h21              1.412E+00      3.32      16146.0 !
!                               rev / 1.412E+00      3.32      16146.0 /

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 6) O2 addition
! cyC9h17+o2=cyC9h17O2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!Ac10h21+o2=c10h21qjA         9.000E+18      -2.50      0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
!Bc10h21+o2=c10h21qjB         1.700E+19      -2.50      0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
!Cc10h21+o2=c10h21qjC         1.800E+19      -2.50      0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Dc10h21+o2=c10h21qjD         1.800E+19      -2.50      0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
!Ec10h21+o2=c10h21qjE         1.800E+19      -2.50      0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 7) alkoxy formation
! cyC9h17+RO2=cyC9h17O+RO
! RO2= ho2, ch3o2, c2h5o2, nc3h7o2, ic3h7o2,
! ch3coo3, hcO3, cyC9h17O2
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

Ac10h21+ho2=c10h21ojA+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+ho2=c10h21ojB+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+ho2=c10h21ojC+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+ho2=c10h21ojD+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+ho2=c10h21ojE+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjA=2c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjA=c10h21ojB+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjA=c10h21ojC+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjA=c10h21ojD+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjA=c10h21ojE+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002

```

```

Cc10h21+ho2=c10h21ojC+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+ho2=c10h21ojD+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+ho2=c10h21ojE+oh      7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+ch3o2=c10h21ojA+ch3o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+ch3o2=c10h21ojB+ch3o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+ch3o2=c10h21ojC+ch3o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+ch3o2=c10h21ojD+ch3o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+ch3o2=c10h21ojE+ch3o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+c2h5o2=c10h21ojA+c2h5o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+c2h5o2=c10h21ojB+c2h5o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+c2h5o2=c10h21ojC+c2h5o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+c2h5o2=c10h21ojD+c2h5o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+c2h5o2=c10h21ojE+c2h5o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+nc3h7o2=c10h21ojA+nc3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+nc3h7o2=c10h21ojB+nc3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+nc3h7o2=c10h21ojC+nc3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+nc3h7o2=c10h21ojD+nc3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+nc3h7o2=c10h21ojE+nc3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+ic3h7o2=c10h21ojA+ic3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Bc10h21+ic3h7o2=c10h21ojB+ic3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Cc10h21+ic3h7o2=c10h21ojC+ic3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Dc10h21+ic3h7o2=c10h21ojD+ic3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002
Ec10h21+ic3h7o2=c10h21ojE+ic3h7o 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjA=2c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjA=c10h21ojB+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjA=c10h21ojC+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjA=c10h21ojD+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjA=c10h21ojE+c10h21ojA 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB 7.000E+12      0.00     -1000.0 !
! Curran 2002

```

```

Bc10h21+c10h21qjB=c10h21o2B      7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjB=c10h21o2C+c10h21o2B  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjB=c10h21o2D+c10h21o2B  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjB=c10h21o2E+c10h21o2B  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjC=c10h21o2A+c10h21o2C  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjC=c10h21o2B+c10h21o2C  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjC=c10h21o2C+c10h21o2C  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjC=c10h21o2D+c10h21o2C  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjC=c10h21o2E+c10h21o2C  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjD=c10h21o2A+c10h21o2D  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjD=c10h21o2B+c10h21o2D  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjD=c10h21o2C+c10h21o2D  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjD=c10h21o2D+c10h21o2D  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjD=c10h21o2E+c10h21o2D  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002

Ac10h21+c10h21qjE=c10h21o2A+c10h21o2E  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Bc10h21+c10h21qjE=c10h21o2B+c10h21o2E  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Cc10h21+c10h21qjE=c10h21o2C+c10h21o2E  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Dc10h21+c10h21qjE=c10h21o2D+c10h21o2E  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002
Ec10h21+c10h21qjE=c10h21o2E+c10h21o2E  7.000E+12  0.00 -1000.0
! Curran 2002

!*****
! decomposition
! c10h21o2j=aldehyde+alkyle
!*****

!c10h21o2jA=ch2o+Ac9h19      1.000E+15  0.00 21600.0 !
!c10h21o2jB=ch3hco+Ac8h17    7.940E+14  0.00 15300.0 !
!c10h21o2jC=ch3+c8h17hco     7.940E+14  0.00 15300.0 !
!c10h21o2jD=ethco+Ac7h15     7.940E+14  0.00 15300.0 !
!c10h21o2jE=c2h5+c7h15hco    7.940E+14  0.00 15300.0 !
!c10h21o2jF=nc3h7+c6h13hco   7.940E+14  0.00 15300.0 !
!c10h21o2jG=nc3h7hco+Ac6h13  7.940E+14  0.00 15300.0 !
!c10h21o2jH=pc4h9+c5h11hco   7.940E+14  0.00 15300.0 !
!c10h21o2jI=nc4h9hco+Ac5h11  7.940E+14  0.00 15300.0 !

c10h21o2jA=ch2o+Ac9h19      2.100E+22  -2.57 12941.0 !

```

```

estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-3457/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jB=ch3hco+Ac8h17      8.420E+09  1.21 9888.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jC=ch3+c8h17hco       5.280E+09  1.24 13999.0 !
estimated from reverse constant k=5.0E+10.exp(-9043/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jD=ethco+Ac7h15       1.900E+10  1.15 9825.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jE=c2h5+c7h15hco      3.890E+12  0.45 9071.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jF=nc3h7+c6h13hco     1.220E+12  0.63 10063.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jG=nc3h7hco+Ac6h13    5.670E+13  0.22 10812.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jH=pc4h9+c5h11hco     2.600E+14  -0.12 11248.5 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275
c10h21o2jI=nc4h9hco+Ac5h11    8.890E+11  0.63 10405.0 !
estimated from reverse constant k=3.33E+10.exp(-6397/RT) Curran 2006
IJK vol. 38 pp. 250-275

!*****
! c10h21q REACTIONS
!*****

c10h21qA=oh+c10h21o2jA      1.500E+16  0.00 42500.0 !
Curran
c10h21qB=oh+c10h21o2jB      1.250E+16  0.00 41600.0 !
Curran
c10h21qC=oh+c10h21o2jC      1.250E+16  0.00 41600.0 !
Curran
c10h21qD=oh+c10h21o2jD      1.250E+16  0.00 41600.0 !
Curran
c10h21qE=oh+c10h21o2jE      1.250E+16  0.00 41600.0 !
Curran

!*****
! c10h21qj REACTIONS
!*****

! 1) isomerisation to QOOH
! 2) hydroperoxyalkyls ROOH formation
! 3) alkoxy RO formation
! 4) reaction with RO2
!*****

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation to QOOH
! c10h21qjX=c10h20rYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h21qjA=c10h20rBqA      3.350E+09  1.00 32500.0 !

```

```

5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjA=c10h20rCqA      5.750E+08  1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjA=c10h20rDqA      9.890E+07  1.00 22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjA=c10h20rEqA      1.700E+07  1.00 21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjB=c10h20rAgB      5.030E+09  1.00 35500.0 !
5-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjB=c10h20rCqB      3.350E+09  1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjB=c10h20rDqB      5.750E+08  1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjB=c10h20rEqB      9.890E+07  1.00 22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjB=c10h20rFqB      1.700E+07  1.00 21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjC=c10h20rAgC      8.630E+08  1.00 28000.0 !
6-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjC=c10h20rCqC      3.350E+09  1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rDqC      3.350E+09  1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rEqC      5.750E+08  1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rFqC      9.890E+07  1.00 22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjC=c10h20rGqC      1.700E+07  1.00 21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjD=c10h20rAgD      1.480E+08  1.00 25000.0 !
7-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjD=c10h20rBqD      5.750E+08  1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rCqD      3.350E+09  1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rEqD      3.350E+09  1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rFqD      5.750E+08  1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rGqD      9.890E+07  1.00 22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjD=c10h20rHqD      1.700E+07  1.00 21000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms

c10h21qjE=c10h20rAgE      2.550E+07  1.00 24000.0 !
8-member ring, 3 primary H atoms
c10h21qjE=c10h20rBqE      9.890E+07  1.00 22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rCqE      5.750E+08  1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rDqE      3.350E+09  1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rEqE      3.350E+09  1.00 32500.0 !
5-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rFqE      5.750E+08  1.00 25000.0 !
6-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rGqE      9.890E+07  1.00 22000.0 !
7-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rHqE      9.890E+07  1.00 22000.0 !
8-member ring, 2 secondary H atoms
c10h21qjE=c10h20rIqE      1.700E+07  1.00 21000.0 !

```

```

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) dismutations with ho2
! ROOH formation
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h21qjA+ho2=c10h21qA+o2    2.900E+11  0.00 1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjB+ho2=c10h21qB+o2    2.900E+11  0.00 1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjC+ho2=c10h21qC+o2    2.900E+11  0.00 1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjD+ho2=c10h21qD+o2    2.900E+11  0.00 1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran
c10h21qjE+ho2=c10h21qE+o2    2.900E+11  0.00 1550.0 !
idem ch3o2 Raventos-Duran

c10h21qjA+h2o2=c10h21qA+ho2  2.400E+12  0.00 10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjB+h2o2=c10h21qB+ho2  2.400E+12  0.00 10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjC+h2o2=c10h21qC+ho2  2.400E+12  0.00 10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjD+h2o2=c10h21qD+ho2  2.400E+12  0.00 10000.0 !
Ribaucour
c10h21qjE+h2o2=c10h21qE+ho2  2.400E+12  0.00 10000.0 !
Ribaucour

c10h21qjA+ho2=c10h21o2A+oh+o2  1.000E+11  0.00 0.0
c10h21qjB+ho2=c10h21o2B+oh+o2  1.000E+11  0.00 0.0
c10h21qjC+ho2=c10h21o2C+oh+o2  1.000E+11  0.00 0.0
c10h21qjD+ho2=c10h21o2D+oh+o2  1.000E+11  0.00 0.0
c10h21qjE+ho2=c10h21o2E+oh+o2  1.000E+11  0.00 0.0

c10h21qjA+ch3o2=c10h21o2A+ch3o+o2  1.400E+16  -1.61 1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjB+ch3o2=c10h21o2B+ch3o+o2  1.400E+16  -1.61 1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjC+ch3o2=c10h21o2C+ch3o+o2  1.400E+16  -1.61 1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjD+ch3o2=c10h21o2D+ch3o+o2  1.400E+16  -1.61 1860.0 !
Westbrook 2009
c10h21qjE+ch3o2=c10h21o2E+ch3o+o2  1.400E+16  -1.61 1860.0 !
Westbrook 2009

c10h21qjA+c10h21qjA=c10h21o2jA+c10h21o2jA+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjB=c10h21o2jA+c10h21o2jB+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjC=c10h21o2jA+c10h21o2jC+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjD=c10h21o2jA+c10h21o2jD+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjA+c10h21qjE=c10h21o2jA+c10h21o2jE+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjB=c10h21o2jB+c10h21o2jB+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjC=c10h21o2jB+c10h21o2jC+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjD=c10h21o2jB+c10h21o2jD+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjB+c10h21qjE=c10h21o2jB+c10h21o2jE+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjC+c10h21qjC=c10h21o2jC+c10h21o2jC+o2  1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009

```

```

c10h21qjC+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD+o2      1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjC+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE+o2      1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjD+c10h21qjD=c10h21ojD+c10h21ojD+o2      1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjD+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE+o2      1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009
c10h21qjE+c10h21qjE=c10h21ojE+c10h21ojE+o2      1.400E+16  -1.61
1860.0 ! Westbrook 2009

#####
! c10h20rKqjY REACTIONS
#####
! 1) isomerisation
! 2) addition to o2
! 3) o-o and c-c breaking
! 4) o-o breaking
! 5) o-rings formation
! 6) c-o breaking
! 7) c-c breaking
! 8) c-h breaking
! 9) oxidation
#####
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 1) isomerisation
! c10h20rYqX=c10h20rZqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h20rDqA=c8h16-1+c2h4o2h      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rEqA=c7h14-1+c3h6ooh1-3    2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rEqB=c7h14-1+c3h6ooh2-1    2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rFqB=c6h12-1+c4h8rDqB      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rFqC=c6h12-1+c4h8rAgB      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rGqC=c5h10+c5h10rAgC      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rAgD=c2h4+c8h16rAgB      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rGqD=c5h10+c5h10rAgB      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rHqD=c4h8+c6h12rAgC      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rAgE=c2h4+c8h16rAgC      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rBqE=c3h6+c7h14rAgB      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rHqE=c4h8+c6h12rAgB      2.000E+13  0.00  28700.0 !
c10h20rIqE=c3h6+c7h14rAgC      2.000E+13  0.00  28700.0 !

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 2) addition to o2
! c5h18rYqX+c2=c9h18qjYqX
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

c10h20rBqA=c10h20qjBqA          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rCqA=c10h20qjCqA          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rDqA=c10h20qjDqA          1.800E+19  -2.50  0.0 !

```

```

Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rEqA=c10h20qjEqA          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rAgB=c10h20qjAgB          1.500E+18  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt)
c10h20rCqB=c10h20qjCqB          1.050E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rDqB=c10h20qjDqB          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rEqB=c10h20qjEqB          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rFqB=c10h20qjFqB          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rAgC=c10h20qjAgC          9.000E+18  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c10h20rBqC=c10h20qjBqC          9.500E+18  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+kt)
c10h20rDqC=c10h20qjDqC          1.050E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rEqC=c10h20qjEqC          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rFqC=c10h20qjFqC          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rGqC=c10h20qjGqC          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rAgD=c10h20qjAgD          9.000E+18  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c10h20rBqD=c10h20qjBqD          1.700E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c10h20rCqD=c10h20qjCqD          1.050E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rEqD=c10h20qjEqD          1.050E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rFqD=c10h20qjFqD          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rGqD=c10h20qjGqD          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rHqD=c10h20qjHqD          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rAgE=c10h20qjAgE          9.000E+18  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)
c10h20rBqE=c10h20qjBqE          1.700E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)
c10h20rCqE=c10h20qjCqE          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rEqE=c10h20qjEqE          1.050E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rFqE=c10h20qjFqE          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kt+ks)
c10h20rGqE=c10h20qjGqE          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rHqE=c10h20qjHqE          1.800E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (2ks)
c10h20rIqE=c10h20qjIqE          1.700E+19  -2.50  0.0 !
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 3) o-o and c-c breaking
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

```

```

!c10h20rCqA=oh+ch2o+c9h18-1      5.000E+13  0.00  25500.0 !
!
!c10h20rDqB=oh+ch3hco+c8h16-1    5.000E+13  0.00  25500.0 !
!
!c10h20rAgC=oh+c7h15hco+c2h4      5.000E+13  0.00  25500.0 !
!
!c10h20rEqC=oh+ethco+c7h14-1      5.000E+13  0.00  25500.0 !
!c10h20rBqD=oh+c6h13hco+c3h6      5.000E+13  0.00  25500.0 !
!c10h20rFqD=oh+nc3h7hco+c6h12-1  5.000E+13  0.00  25500.0 !
!
!c10h20rCqE=oh+c5h11hco+c4h8      5.000E+13  0.00  25500.0 !
!
!c10h20rGqE=oh+nc4h9hco+c5h10    5.000E+13  0.00  25500.0 !
!
c10h20rCqA=oh+ch2o+c9h18-1      3.670E+12  0.545  28377.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rDqB=oh+ch3hco+c8h16-1    1.270E+18  -1.12  29189.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rAgC=oh+c7h15hco+c2h4      6.380E+15  -0.49  28717.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=1.3E+04.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rEqC=oh+ethco+c7h14-1      5.460E+17  -1.00  28585.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rBqD=oh+c6h13hco+c3h6      1.240E+15  -0.19  27943.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rFqD=oh+nc3h7hco+c6h12-1  1.300E+17  -0.81  28398.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rCqE=oh+c5h11hco+c4h8      8.470E+15  -0.44  28015.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275
c10h20rGqE=oh+nc4h9hco+c5h10    4.490E+16  -0.665  28240.0 !
estimated from reverse constant alkyl+alkene k=8.8E+03.T^2.48.exp(-6130/RT) Curran 2006 IJCK vol. 38 pp. 250-275

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 5) o-rings formation
! (o-o breaking)
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!c10h20rBqA=oh+c10h20o-AB        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rCqA=oh+c10h20o-AC        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rDqA=oh+c10h20o-AD        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rEqA=oh+c10h20o-AE        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rBqB=oh+c10h20o-AB        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rGqB=oh+c10h20o-BG        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rAgD=oh+c10h20o-AD        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rHqD=oh+c10h20o-DH        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rAgE=oh+c10h20o-AE        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE        2.950E+11  0.00  22000.0 !

```

```

!c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rAgC=oh+c10h20o-AC        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rBqC=oh+c10h20o-BC        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rCqC=oh+c10h20o-CD        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rEqC=oh+c10h20o-CE        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rFqC=oh+c10h20o-CF        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rGqC=oh+c10h20o-CG        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rAgD=oh+c10h20o-AD        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE        2.950E+11  0.00  22000.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 2
!c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rHqD=oh+c10h20o-DH        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rAgE=oh+c10h20o-AE        1.500E+08  0.00  1800.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 8
!c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE        2.100E+08  0.00  6500.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 4.4 and E lowered by 500 cal/mol
!c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE        2.500E+10  0.00  15250.0 !
! Curran et al. Combustion and Flame 2002 vol. 129 pp. 253-280 A
divided by 3
!c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE        2.950E+11  0.00  22000.0 !

```





c10h20qjAgE=>oh+c10h19oEqA 8.495E+06 1.00 19000.0 !  
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c10h20qjBqE=>oh+c10h19oEqB 4.945E+07 1.00 20000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c10h20qjCqE=>oh+c10h19oEqC 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c10h20qjDqE=>oh+c10h19oEqD 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c10h20qjFqE=>oh+c10h19oEqF 1.675E+09 1.00 30500.0 !  
5-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c10h20qjGqE=>oh+c10h19oEqG 2.875E+08 1.00 23000.0 !  
6-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c10h20qjHqE=>oh+c10h19oEqH 4.945E+07 1.00 20000.0 !  
7-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol  
c10h20qjIqE=>oh+c10h19oEqI 8.495E+06 1.00 19000.0 !  
8-member ring, 1 secondary H atom E-2000cal/mol

#####  
! c10h19oq REACTIONS  
!#####

!\*\*\*\*\*  
! ketohydroperoxides DECOMPOSITION  
!\*\*\*\*\*

!c10h19oAgB=>oh+hco+c8h17hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oAgC=>oh+ch2hco+c7h15hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oAgD=>oh+ch2ch2hco+c6h13hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oAgE=>oh+c3h6cho-1+c5h11hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !

!c10h19oBqA=>oh+ch2o+c8h17co 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oBqC=>oh+ch3co+c7h15hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oBqD=>oh+ch2coch3+c6h13hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c5h11hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oBqF=>oh+c3h6coc3-1+nc4h9hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !

!c10h19oCqA=>oh+ch2o+nc7h15coc2h 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oCqB=>oh+ch3hco+c7h15co 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oCqC=>oh+ch3coc+c6h13co 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oCqD=>oh+c2h5coc2+c5h11hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oCqE=>oh+c2h5coc2h4p+nc4h9hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+nc3h7hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !

!c10h19oDqA=>oh+ch2o+nc6h13coc2h4p 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oDqB=>oh+ch3hco+nc6h13coc2h 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oDqC=>oh+ethco+nc5h11coc2h 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oDqD=>oh+c3h7co+c5h11hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oDqE=>oh+nc4h9hco+nc3h7coc2h 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oDqF=>oh+nc3h7hco+nc3h7coc2h4p 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oDqH=>oh+ethco+nc3h7coc3h6-1 1.000E+16 0.00 44500.0 !

!c10h19oEqA=>oh+ch2o+nc5h11coc3h6-1 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oEqB=>oh+ch3hco+nc5h11coc2h4p 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oEqC=>oh+ethco+nc5h11coc2h 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oEqD=>oh+nc3h7hco+c5h11co 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oEqE=>oh+nc4h9hco+nc4h9hco 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oEqG=>oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oEqH=>oh+ethco+nc4h9coc2h4p 1.000E+16 0.00 44500.0 !  
!c10h19oEqI=>oh+ch3hco+nc4h9coc3h6-1 1.000E+16 0.00 44500.0 !

c10h20o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+Ac5h11 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+Ac5h11 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+Ac5h11 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CD+h=>h2+c3h2+c2h3coc6h13 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-CD+oh=>h2o+c3h2+c2h3coc6h13 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-CD+ho2=>h2o2+c3h2+c2h3coc6h13 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+pc4h9 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+pc4h9 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+pc4h9 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc5h11 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc5h11 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc5h11 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-EF+h=>h2+c2h3coc4h9+nc3h7 4.800E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-EF+oh=>h2o+c2h3coc4h9+nc3h7 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc4h9+nc3h7 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AC+h=>h2+c9h18-1+hco 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c10h20o-AC+oh=>h2o+c9h18-1+hco 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c9h18-1+hco 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AC+h=>h2+c2h4+c7h15co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-AC+oh=>h2o+c2h4+c7h15co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c7h15co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BD+h=>h2+c3h3+c8h16-1 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BD+oh=>h2o+c3h3+c8h16-1 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BD+ho2=>h2o2+c3h3+c8h16-1 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BD+h=>h2+c3h6+c6h13co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BD+oh=>h2o+c3h6+c6h13co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c6h13co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CE+h=>h2+c7h14-1+c2h5co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-CE+oh=>h2o+c7h14-1+c2h5co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2h5co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CE+h=>h2+c4h8+c5h11co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-CE+oh=>h2o+c4h8+c5h11co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c5h11co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DF+h=>h2+c6h12-1+c3h7co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-DF+oh=>h2o+c6h12-1+c3h7co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c3h7co 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DF+h=>h2+c5h10+nc4h9co 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-DF+oh=>h2o+c5h10+nc4h9co 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+nc4h9co 1.000E+04 2.50 9400.0 !

c10h19oAgB=>oh+hco+c8h17hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oAgC=>oh+ch2hco+c7h15hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oAgD=>oh+ch2ch2hco+c6h13hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oAgE=>oh+c3h6cho-1+c5h11hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !

c10h19oBqA=>oh+ch2o+c8h17co 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oBqC=>oh+ch3co+c7h15hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oBqD=>oh+ch2coch3+c6h13hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c5h11hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oBqF=>oh+c3h6coc3-1+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !

c10h19oCqA=>oh+ch2o+nc7h15coc2h 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oCqB=>oh+ch3hco+c7h15co 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oCqC=>oh+c2h5coc+c6h13hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oCqD=>oh+c2h5coc2+c5h11hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oCqE=>oh+c2h5coc2h4p+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+nc3h7hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !

c10h19oDqA=>oh+ch2o+nc6h13coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oDqB=>oh+ch3hco+nc6h13coc2h 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oDqC=>oh+ethco+c6h13co 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oDqD=>oh+c3h7co+c5h11hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oDqE=>oh+nc4h9hco+nc3h7coc2h 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oDqF=>oh+nc3h7hco+nc3h7coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oDqH=>oh+ethco+nc3h7coc3h6-1 1.500E+16 0.00 44500.0 !

c10h19oEqA=>oh+ch2o+nc5h11coc3h6-1 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oEqB=>oh+ch3hco+nc5h11coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oEqC=>oh+ethco+nc5h11coc2h 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oEqD=>oh+nc3h7hco+c5h11co 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oEqE=>oh+nc4h9hco+nc4h9hco 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oEqG=>oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oEqH=>oh+ethco+nc4h9coc2h4p 1.500E+16 0.00 44500.0 !  
c10h19oEqI=>oh+ch3hco+nc4h9coc3h6-1 1.500E+16 0.00 44500.0 !

#####  
! c10h20o REACTIONS  
!#####

!\*\*\*\*\*  
! O-ring decomposition  
!\*\*\*\*\*

c10h20o-AB+h=>h2+acrol+Ac7h15 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c10h20o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac7h15 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac7h15 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AB+h=>h2+ch2co+Ac8h17 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac8h17 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac8h17 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BC+h=>h2+mvk+Ac6h13 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac6h13 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac6h13 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac7h15 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac7h15 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac7h15 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AD+h=>h2+c2h4+nc6h13coc2h 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c10h20o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc6h13coc2h 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc6h13coc2h 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AD+h=>h2+c8h16-1+c2h2hco 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-AD+oh=>h2o+c8h16-1+c2h2hco 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c8h16-1+c2h2hco 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BE+h=>h2+c7h14-1+c2coc3h3 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BE+oh=>h2o+c7h14-1+c2coc3h3 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2coc3h3 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BE+h=>h2+c3h6+nc5h11coc2h 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc5h11coc2h 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc5h11coc2h 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CF+h=>h2+c6h12-1+c2h5coc2h 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-CF+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5coc2h 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5coc2h 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CF+h=>h2+c4h8+nc4h9coc2h 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc4h9coc2h 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9coc2h 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-DG+h=>h2+c5h10+nc3h7coc2h 4.800E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-DG+oh=>h2o+c5h10+nc3h7coc2h 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-DG+ho2=>h2o2+c5h10+nc3h7coc2h 4.000E+12 0.00 13260.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AE+h=>h2+c7h14-1+c2ch2hco 4.800E+08 1.50 2785.0 !  
c10h20o-AE+oh=>h2o+c7h14-1+c2ch2hco 2.400E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2ch2hco 2.500E+04 2.50 11605.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-AE+h=>h2+c2h4+nc5h11coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc5h11coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BF+h=>h2+c6h12-1+c3coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BF+oh=>h2o+c6h12-1+c3coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c3coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
! Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BF+h=>h2+Fc10h9oB 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BF+oh=>h2o+Fc10h9oB 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BF+ho2=>h2o2+Fc10h9oB 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-BF+h=>h2+c3h6+nc4h9coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc4h9coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !  
c10h20o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9coc2h4p 1.000E+04 2.50 9400.0 !  
Scott and Walker 2002 Comm. & Flame vol. 129 pp.365-377

c10h20o-CG+h=>h2+c5h10+c2h5coc2h4p 2.400E+08 1.50 2005.0 !  
c10h20o-CG+oh=>h2o+c5h10+c2h5coc2h4p 1.200E+06 2.00 -1192.0 !





!\*\*\*\*\*  
nc7h15coch2=Ac7h15+ch2co 1.000E+13 0.00  
28000.0 ! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311  
nc7h15coch2+o2=nc7h15coch2o2 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc7h15coch2+o2=nc7h15coch2o2 2.290E+11 0.00 -  
1790.0 ! Atkinson et al., 2001  
!nc7h15coch2o2+ho2=nc7h15coch2o2h+o2 2.290E+11 0.00 -  
1790.0 ! Atkinson et al., 2001  
!nc7h15coch2o2h=nc7h15coch2o2h+o2 1.500E+16 0.00  
42500.0 ! 17 anc7, primary s  
!ch2o+nc7h15co=nc7h15coch2o 1.500E+11 0.00  
11900.0 ! 18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc6h13coch2  
!\*\*\*\*\*  
nc6h13coch2=Ac6h13+ch2co 1.000E+13 0.00  
28000.0 ! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311  
nc6h13coch2+o2=nc6h13coch2o2 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc6h13coch2+o2=nc6h13coch2o2h+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc6h13coch2o2h=nc6h13coch2o2h+o2 1.500E+16 0.00  
42500.0 ! 17 anc7, primary s  
!ch2o+nc6h13co=nc6h13coch2o 1.500E+11 0.00  
11900.0 ! 18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc5h11coch2  
!\*\*\*\*\*  
nc5h11coch2=Ac5h11+ch2co 1.000E+13 0.00  
28000.0 ! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311  
nc5h11coch2+o2=nc5h11coch2o2 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc5h11coch2+o2=nc5h11coch2o2h+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc5h11coch2o2+ho2=nc5h11coch2o2h+o2 2.290E+11 0.00 -  
1790.0 ! Atkinson et al., 2001  
!nc5h11coch2o2h=nc5h11coch2o2h+o2 1.500E+16 0.00  
42500.0 ! 17 anc7, primary s  
!ch2o+nc5h11co=nc5h11coch2o 1.500E+11 0.00  
11900.0 ! 18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc4h9coch2  
!\*\*\*\*\*  
nc4h9coch2=pc4h9+ch2co 1.000E+13 0.00 28000.0  
! Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311  
nc4h9coch2+o2=nc4h9coch2o2 9.000E+18 -2.50  
0.0 ! Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc4h9coch2+o2=nc4h9coch2o2h+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc4h9coch2o2h=nc4h9coch2o2h+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc4h9coch2o2h+o2=nc4h9coch2o2h+o2 1.500E+16 0.00 42500.0 !  
17 anc7, primary s  
!ch2o+nc4h9co=nc4h9coch2o 1.500E+11 0.00  
11900.0 ! 18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc3h7coc3h6-1  
!\*\*\*\*\*  
nc3h7coc3h6-1=nc3h7coc2h4+c2h4 2.000E+13 0.00 27000.0 !  
nc3h7coc3h6-1+o2=nc3h7coc3h6o2-1 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc3h7coc3h6o2-1+ho2=nc3h7coc3h6o2h-1+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc3h7coc3h6o2h-1+ho2=nc3h7coc3h6o2h-1+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc3h7coc3h6o2h-1+ho2=nc3h7coc3h6o2h-1+o2 1.500E+16 0.00 42500.0 !  
17 anc7, primary s  
!ch2o+nc3h7coc2h4p=nc3h7coc3h6o-1 1.500E+11 0.00 11900.0 !  
18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! c4h9coc3h6-1  
!\*\*\*\*\*  
c2h4+nc4h9coc2=nc4h9coc3h6-1 1.320E+04 2.48 6130.0 !  
addition de Rc(=o)ch2 sur c de c=c  
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9  
!  
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)  
nc4h9coc3h6-1+o2=nc4h9coc3h6o2-1 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc4h9coc3h6o2-1+ho2=nc4h9coc3h6o2h-1+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc4h9coc3h6o2h-1+ho2=nc4h9coc3h6o2h-1+o2 1.500E+16 0.00 42500.0 !  
17 anc7, primary s  
!ch2o+nc4h9coc2h4p=nc4h9coc3h6o-1 1.500E+11 0.00 11900.0 !  
18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc5h11coc3h6-1  
!\*\*\*\*\*  
c2h4+nc5h11coc2=nc5h11coc3h6-1 1.320E+04 2.48 6130.0 !

!\*\*\*\*\*  
! c2h5coc3h6-1  
!\*\*\*\*\*  
c2h5coc3h6-1=nc2h5coc2h4+c2h4 2.000E+13 0.00 27000.0 !  
c2h5coc3h6-1+o2=nc2h5coc3h6o2-1 9.000E+18 -2.50  
0.0 ! Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
c2h5coc3h6o2-1+ho2=nc2h5coc3h6o2h-1+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!c2h5coc3h6o2h-1+ho2=nc2h5coc3h6o2h-1+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!c2h5coc3h6o2h-1+ho2=nc2h5coc3h6o2h-1+o2 1.500E+16 0.00 42500.0 !  
17 anc7, primary s  
!ch2o+nc2h5coc2h4p=nc2h5coc3h6o-1 1.500E+11 0.00 11900.0 !  
18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc3h7coc2h4p  
!\*\*\*\*\*  
!nc3h7coc2h4p=c3h7co+c2h4 5.398E+17 -1.45 26040.0 !  
! rev / 2.500E+11 0.00 7800.0 /  
nc3h7coc2h4p=c3h7co+c2h4 1.550E+17 -1.46 27840.0 !  
nc3h7coc2h4p+o2=nc3h7coc2h4o2 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc3h7coc2h4o2+o2=nc3h7coc2h4o2h+o2 2.290E+11 0.00 -  
1790.0 ! Atkinson et al., 2001  
!nc3h7coc2h4o2h+o2=nc3h7coc2h4o2h+o2 2.290E+11 0.00 -  
1790.0 ! Atkinson et al., 2001  
!nc3h7coc2h4o2h+o2=nc3h7coc2h4o2h+o2 1.500E+16 0.00  
42500.0 ! 17 anc7, primary s  
!ch2o+nc3h7coc2h4p=nc3h7coc2h4o 1.500E+11 0.00 11900.0 !  
18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc4h9coc2h4p  
!\*\*\*\*\*  
!nc4h9coc2h4p=nc4h9coc2h4 2.500E+11 0.00 7800.0 !  
!nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2 7.000E+10 0.00 9600.0 !  
nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2 1.550E+17 -1.46 27840.0 !  
nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2 9.000E+18 -2.50 0.0 !  
Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc4h9coc2h4o2+ho2=nc4h9coc2h4o2h+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc4h9coc2h4o2h+ho2=nc4h9coc2h4o2h+o2 2.290E+11 0.00 -  
1790.0 ! Atkinson et al., 2001  
!nc4h9coc2h4o2h+ho2=nc4h9coc2h4o2h+o2 1.500E+16 0.00  
42500.0 ! 17 anc7, primary s  
!ch2o+nc4h9coc2h4p=nc4h9coc2h4o 1.500E+11 0.00 11900.0 !  
18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! nc5h11coc2h4  
!\*\*\*\*\*  
nc5h11coc2h4p=c5h11co+c2h4 1.550E+17 -1.46 27840.0 !  
nc5h11coc2h4p+o2=nc5h11coc2h4o2 9.000E+18 -2.50  
0.0 ! Buda et al., Combust. Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
nc5h11coc2h4o2+ho2=nc5h11coc2h4o2h+o2 2.290E+11 0.00 -1790.0 !  
Atkinson et al., 2001  
!nc5h11coc2h4o2h+ho2=nc5h11coc2h4o2h+o2 2.290E+11 0.00 -  
1790.0 ! Atkinson et al., 2001  
!nc5h11coc2h4o2h+ho2=nc5h11coc2h4o2h+o2 1.500E+16 0.00  
42500.0 ! 17 anc7, primary s  
!ch2o+nc5h11coc2h4p=nc5h11coc2h4o 1.500E+11 0.00 11900.0 !  
18 anc7, alk to te  
!\*\*\*\*\*  
! ch3coc5h9-1  
!\*\*\*\*\*  
ch3coc5h9-1+oh=ch2coc5h9-1+h2o 5.100E+11 0.00 1192.0 !  
ch3coc5h9-1+ho2=ch2coc5h9-1+h2o2 2.380E+04 2.55 14690.0 !  
ch3coc5h9-1+h=ch2coc5h9-1+h2 9.300E+12 0.00 6357.0 !  
ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-15+h2o 8.450E+11 0.00 -228.0 !  
ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-15+h2o2 2.000E+11 0.00 8698.0 !  
ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-15+h2 4.460E+06 2.00 3200.0 !  
ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-13+h2o 4.186E+06 2.00 -543.0 !  
idem c4h8  
ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-13+h2o2 1.000E+11 0.00 17060.0 !  
Yahyaoui  
ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-13+h2 6.550E+12 0.00 4445.0 !  
Yahyaoui  
!ch2coc5h9-1+ch2coc5h9-1 1.570E+13 0.00 30000.0 !  
!ch2coc5h9-1+ch2coc5h9-1 3.330E+10 0.00 6397.0 !  
Addition of ch3 to c of c=o  
!  
Analogy with ch3cho + c2h5 = sc4h9o, Table XII  
!  
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)  
!ch3coc5h8-15+mvk+ac3h5 2.500E+13 0.00 45000.0 !  
!mvk+ac3h5=ch3coc5h8-15 8.800E+03 2.48 6130.0 !  
!prim allyl rad add to ext c=c 1.320E+04 2.48 6130.0 !  
!c4h6+ch2coc3=ch3coc5h8-13 2.130E+02 2.91 9290.0 !  
!c4h6+ch2coc3=ch3coc5h8-13 1.320E+04 2.48 6130.0 !  
!addition de ch3 sur c de c=c  
!  
Analogy with c2h4 + c2h5 = pc4h9  
!  
H.J. Curran, Int J Chem Kinet 38:250-275, (2006)  
!c2h5coc5h9-1  
!\*\*\*\*\*  
c2h5coc5h9-1+oh=nc2h4coc5h9-1+h2o 8.450E+11 0.00 -228.0 !  
c2h5coc5h9-1+ho2=nc2h4coc5h9-1+h2o2 2.000E+11 0.00 8698.0 !  
c2h5coc5h9-1+h=nc2h4coc5h9-1+h2 4.460E+06 2.00 3200.0 !  
c2h5coc5h9-1+oh=nc2h5coc5h8-15+h2o 8.450E+11 0.00 -228.0 !  
c2h5coc5h9-1+ho2=nc2h5coc5h8-15+h2o2 2.000E+11 0.00 8698.0 !





```

(=2pc4h9+ch3)
cyc6h11+c2h3=cyc6h10+c2h4      4.000E+12      0.00      0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+c2h5=cyc6h10+c2h6      4.000E+12      0.00      0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+ac3h5=cyc6h10+c3h6      4.000E+11      0.00      0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+sc3h5=cyc6h10+c3h6      4.000E+11      0.00      0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+tc3h5=cyc6h10+c3h6      4.000E+12      0.00      0.0 !
(=cyc6h11+ch3)
cyc6h11+hco=cyc6h10+ch2o        4.000E+12      0.00      0.0 !
(=cyc6h11+ch3)

cyc6h11=cyc6h10+h
Ristori 2000

!Réactivité de basse température

!cyc6h11+o2=chxqjA
DeSain 2003      1.840E+45     -11.10     6538.0 !
cyc6h11+o2=chxqjA
Cavalotti      1.500E+09      0.00      0.0 !

chxqjA=cyc6h10+ho2      2.850E+12      0.00     29000.0 !
!chxqjA=chxqArC      1.860E+11      0.00     24077.0 !
chxqjA=chxqArC      4.278E+09      1.00     28226.6 !
chxqArC=chxo-AC+oh      1.400E+12      0.00     20000.0 !
chxqArC+o2=chxqAjC      1.840E+45     -11.10     6538.0 !
DeSain 2003

!chxqAjC=oh+chxoAgC      4.640E+10      0.00     21076.6 !
chxqAjC=oh+chxoAgC      1.070E+09      1.00     24365.9 !
!chxqAjC=chxqAgCrE      9.280E+10      0.00     21076.6 !
chxqAjC=chxqAgCrE      2.139E+09      1.00     28226.6 !
chxoAgC=chxoAoJc+oh      1.500E+16      0.00     42000.0 !

Fc6AoC=chxoAoJc      1.000E+08      0.86     5900.0 !
c2h4+ch2coch2hco=Fc6AoC      1.320E+04      2.48     6130.0 !
ch2co+ch2hco=ch2coch2hco      1.760E+04      2.48     6130.0 !
Fc6AoE=chxoAoJc      1.000E+08      0.86     5900.0 !
ch2co+c3h6cho-1=Fc6AoE      1.320E+04      2.48     6130.0 !

c6e5oAqC+oh=chxqAgCrE      4.760E+07      1.54     34700.0 !
c6e5oAqC+oh=c6e5oAgC      1.810E+13      0.00      0.0 !
ac3h5hco+ch2hco=c6e5oAqC      1.000E+11      0.00     3496.0 !

chxo-AC+oh=Cchxone+h2o      3.400E+06      1.90    -1451.0 !
chxo-AC+h=Cchxone+h2      1.200E+06      2.40     2583.0 !
chxo-AC+ch3=Cchxone+ch4      1.790E+04      2.33     6147.0 !
chxo-AC+ho2=Cchxone+h2o2      3.000E+04      2.50     12260.0 !

!*****
!*** Cyclohexène cyc6h10 ***
!*****

! retro-Diels-Alder
cyc6h10+c4h6+c2h4      1.500E+15      0.00     66900.0 !
Dayma 2003 retro Diels-Alder

! initiation

cyc6h10+o2=cyc6h9+ho2      7.200E+13      0.00     34800.0 !
Dayma

```

```

cyc6h10+o2=chxelrD+ho2      4.000E+13      0.00     50700.0 !
Dayma

cyc6h10=cyc6h9+h      1.200E+15      0.00     83200.0 !
Dayma
cyc6h10=chxelrD+h      1.200E+15      0.00     98900.0 !
Dayma

cyc6h10=chD13+h2      5.000E+13      0.00     61700.0 !
Dayma 2003

! metathesis

!cyc6h10      = cyc6h9 +      h      5.010E+15      0.0
81700.0 ! (85DEAN)
!cyc6h10 + o2      = cyc6h9 +      ho2      1.580E+10      0.0
25000.0 ! (75ShA/DEN)
!cyc6h10 + ho2      = cyc6h9 +      h2o2      2.000E+11      0.0
17060.0 ! (=2* C4h8+hO2)
!cyc6h10 + oh      = cyc6h9 +      h2o      6.000E+13      0.0
300.0 ! (ESTIMEE)
!cyc6h10 + o      = cyc6h9 +      oh      3.230E+13      0.0
2508.0 ! (=cyc6h10+h)
!cyc6h10 + h      = cyc6h9 +      h2      3.200E+13      0.0
2508.0 ! (75hOY/PRE)
!cyc6h10 + ch3      = cyc6h9 +      ch4      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (ESTIMEE)
!cyc6h10 + c2h3      = cyc6h9 +      c2h4      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 + c2h5      = cyc6h9 +      c2h6      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 + ac3h5      = cyc6h9 +      c3h6      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 + sc3h5      = cyc6h9 +      c3h6      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 + tc3h5      = cyc6h9 +      c3h6      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 + hco      = cyc6h9 +      ch2o      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (=cyc6h10+ch3)
!cyc6h10 + ch3o      = cyc6h9 +      ch3oh      1.650E+11      0.0
4118.0 ! (=cyc6h10+ch3)

cyc6h10+o=cyc6h9+oh      1.800E+11      0.70     3250.0 !
Dayma
cyc6h10+h=cyc6h9+h2      1.100E+05      2.50    -1900.0 !
Dayma
cyc6h10+oh=cyc6h9+h2o      6.000E+06      2.00    -1520.0 !
Dayma
cyc6h10+ho2=cyc6h9+h2o2      1.300E+04      2.60     12400.0 !
Dayma
cyc6h10+ch3=cyc6h9+ch4      2.000E+11      0.00     7300.0 !
Dayma
cyc6h10+c2h3=cyc6h9+c2h4      2.000E+11      0.00     7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+c2h5=cyc6h9+c2h6      2.000E+11      0.00     7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+ac3h5=cyc6h9+c3h6      2.000E+11      0.00     7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+sc3h5=cyc6h9+c3h6      2.000E+11      0.00     7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+tc3h5=cyc6h9+c3h6      2.000E+11      0.00     7300.0 !
=cyc6h10+ch3

chxone+h=Dchxone+h2      1.300E+06      2.40     2583.0 !
idem pch
chxone+o2=Dchxone+ho2      7.000E+12      0.00     49910.0 !
idem pch
chxone+ho2=Dchxone+h2o2      9.514E+03      2.60     13910.0 !
idem pch
chxone+ch3=Dchxone+ch4      1.510E+00      3.50     5481.0 !
idem pch
chxone+o=Dchxone+oh      5.500E+05      2.50     2830.0 !
idem pch

!*****
!*** Cyclohexanone Xchxone ***
!*****

Bchxone+h=chxe2oA      1.200E+13      0.00     38200.0 !
estimation walker
!Bchxone+o2=chxe2oA+ho2      1.020E+12      0.00     22654.0 !
idem dc4h7-1
Bchxone+o2=chxe2oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran

Fc6e1oC=Bchxone      1.000E+08      0.86     5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK 35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
!
Ring opening step.
Cchxone+h+chxe2oA      1.200E+13      0.00     33820.0 !
estimation walker
Cchxone+h+chxe3oA      1.200E+13      0.00     38115.0 !
estimation walker
Cchxone+o2=chxe2oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
Cchxone+o2=chxe3oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
!Cchxone+o2=ho2+chxe2oA      1.020E+12      0.00     22654.0 !
idem dc4h7-1
!Cchxone+o2=ho2+chxe2oA      9.600E+12      0.00     2500.0 !
!Cchxone+o2=ho2+chxe3oA      9.600E+12      0.00     5000.0 !

c6e5oYA=Cchxone      1.000E+08      0.86     5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK 35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
!
Ring opening step.
Ac6e5oC=Cchxone      1.000E+08      0.86     5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK 35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
!
Ring opening step.
c2h4+ac3h5co=Ac6e5oC      1.000E+11      0.00     7800.0 !
addition de c=O sur c de c=C
!
analogy with c4h6+hco=c4h6cho1-43
!
Curran, h. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K.
!
Combustion and Flame 129:253-280 (2002).

Dchxone+h+chxe3oA      1.200E+13      0.00     37315.0 !
estimation walker
Dchxone+o2=chxe3oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
!Cchxone+o2=chxe3oA+ho2      1.020E+12      0.00     22654.0 !
idem dc4h7-1

```

```

cyc6h10+hco=cyc6h9+ch2o      2.000E+11      0.00     7300.0 !
=cyc6h10+ch3
cyc6h10+ch3o=cyc6h9+ch3oh      2.000E+11      0.00     7300.0 !
=cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+c2h3=cyc6h9+c2h4      1.650E+11      0.00     4118.0 !
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+c2h5=cyc6h9+c2h6      1.650E+11      0.00     4118.0 !
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+ac3h5=cyc6h9+c3h6      1.650E+11      0.00     4118.0 !
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+sc3h5=cyc6h9+c3h6      1.650E+11      0.00     4118.0 !
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+tc3h5=cyc6h9+c3h6      1.650E+11      0.00     4118.0 !
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+hco=cyc6h9+ch2o      1.650E+11      0.00     4118.0 !
! =cyc6h10+ch3
!!cyc6h10+ch3o=cyc6h9+ch3oh      1.650E+11      0.00     4118.0 !
! =cyc6h10+ch3

cyc6h10+o=chxelrD+oh      5.200E+13      0.00     5200.0 !
Dayma
cyc6h10+h=chxelrD+h2      1.800E+07      2.00     5000.0 !
Dayma
cyc6h10+oh=chxelrD+h2o      5.200E+06      2.00    -770.0 !
Dayma
cyc6h10+ho2=chxelrD+h2o2      8.000E+11      0.00     15500.0 !
Dayma
cyc6h10+ch3=chxelrD+ch4      4.000E+11      0.00     9600.0 !
Dayma

!*****
!*** Cyclohexanone chxone ***
!*****

chxone+oh=Bchxone+h2o      1.690E+12      0.00    -228.0 !
idem butanone*2
chxone+h=Bchxone+h2      8.920E+06      2.00     3200.0 !
idem butanone*2
chxone+o2=Bchxone+ho2      3.100E+13      0.00     41970.0 !
idem butanone*2
chxone+ho2=Bchxone+h2o2      4.000E+11      0.00     8698.0 !
idem butanone*2
chxone+ch3=Bchxone+ch4      3.480E+00      3.46     3680.0 !
idem butanone*2
chxone+o=Bchxone+oh      6.140E+13      0.00     3400.0 !
idem butanone*2

chxone+oh=Cchxone+h2o      1.100E+13      0.00      790.0 !
idem pch
chxone+h=Cchxone+h2      2.600E+06      2.40     2583.0 !
idem pch
chxone+o2=Cchxone+ho2      1.400E+13      0.00     49910.0 !
idem pch
chxone+ho2=Cchxone+h2o2      1.928E+04      2.60     13910.0 !
idem pch
chxone+ch3=Cchxone+ch4      3.020E+00      3.50     5481.0 !
idem pch
chxone+o=Cchxone+oh      1.100E+06      2.50     2830.0 !
idem pch

chxone+oh=Dchxone+h2o      5.500E+12      0.00      790.0 !
idem pch

```

```

chxone+h=Dchxone+h2      1.300E+06      2.40     2583.0 !
idem pch
chxone+o2=Dchxone+ho2      7.000E+12      0.00     49910.0 !
idem pch
chxone+ho2=Dchxone+h2o2      9.514E+03      2.60     13910.0 !
idem pch
chxone+ch3=Dchxone+ch4      1.510E+00      3.50     5481.0 !
idem pch
chxone+o=Dchxone+oh      5.500E+05      2.50     2830.0 !
idem pch

!*****
!*** Cyclohexanone Xchxone ***
!*****

Bchxone+h=chxe2oA      1.200E+13      0.00     38200.0 !
estimation walker
!Bchxone+o2=chxe2oA+ho2      1.020E+12      0.00     22654.0 !
idem dc4h7-1
Bchxone+o2=chxe2oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran

Fc6e1oC=Bchxone      1.000E+08      0.86     5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK 35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
!
Ring opening step.
Cchxone+h+chxe2oA      1.200E+13      0.00     33820.0 !
estimation walker
Cchxone+h+chxe3oA      1.200E+13      0.00     38115.0 !
estimation walker
Cchxone+o2=chxe2oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
Cchxone+o2=chxe3oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
!Cchxone+o2=ho2+chxe2oA      1.020E+12      0.00     22654.0 !
idem dc4h7-1
!Cchxone+o2=ho2+chxe2oA      9.600E+12      0.00     2500.0 !
!Cchxone+o2=ho2+chxe3oA      9.600E+12      0.00     5000.0 !

c6e5oYA=Cchxone      1.000E+08      0.86     5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK 35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
!
Ring opening step.
Ac6e5oC=Cchxone      1.000E+08      0.86     5900.0 !
matheu et al. Table 1 IJCK 35: 95-119 (2003) for 1,6 endo addition.
!
Ring opening step.
c2h4+ac3h5co=Ac6e5oC      1.000E+11      0.00     7800.0 !
addition de c=O sur c de c=C
!
analogy with c4h6+hco=c4h6cho1-43
!
Curran, h. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K.
!
Combustion and Flame 129:253-280 (2002).

Dchxone+h+chxe3oA      1.200E+13      0.00     37315.0 !
estimation walker
Dchxone+o2=chxe3oA+ho2      1.000E+09      0.00      0.0 !
idem c4h7+o2 Curran
!Cchxone+o2=chxe3oA+ho2      1.020E+12      0.00     22654.0 !
idem dc4h7-1

```









phc2h5+oh=Aphc2h4+h2o 1.990E+07 1.80 1133.0 !  
 Cohen 1991, idem c2h6 mais divisé par 2 7.090E+06 1.90 -1159.0 !  
 !phc2h5+oh=Bphc2h4+h2o  
 Cohen 1991, idem c3h8->ic3h7 mais E diminué de 1000 cal 4.800E+12 0.00 0.0 !  
 phc2h5+oh=Bphc2h4+h2o  
 Baulch et al. 1992

phc2h5+o=Aphc2h4+oh 4.998E+08 1.50 5802.0 !  
 Baulch 1994, idem c2h6 mais divisé par 2 5.490E+05 2.50 2140.0 !  
 !phc2h5+o=Bphc2h4+oh  
 Tsang 1988, idem c3h8->ic3h7 mais E diminué de 1000 cal 2.230E+13 0.00 3795.5 !  
 phc2h5+o=Bphc2h4+oh  
 Baulch et al. 2005

phc2h5+ho2=>Aphc2h4+h2o2 1.800E+04 2.50 16792.0 !  
 Scott 2002  
 phc2h5+ho2=>Bphc2h4+h2o2 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
 Scott 2002

!phc2h5+ho2=Aphc2h4+h2o2 3.550E+04 2.50 16851.5 !  
 Baulch et al. 2005  
 !phc2h5+ho2=Bphc2h4+h2o2 6.200E+04 2.50 13522.9 !  
 Baulch et al. 2005

phc2h5+ch3=Aphc2h4+ch4 2.745E-01 4.00 8287.0 !  
 Tsang 1986/Warnatz 1984, idem c2h6 mais divisé par 2 7.505E-01 3.46 4485.0 !  
 phc2h5+ch3=Bphc2h4+ch4  
 Tsang 1988, idem c3h8->ic3h7 mais E diminué de 1000 cal

!\*\*\*\*\*  
 ! phc2h4 Ethylphenyle radical reactions  
 !\*\*\*\*\*

!Aphc2h4=styren+h 3.160E+13 0.00 50670.0 !  
 88BR0/MUL idBphc2h4 09/10/2000  
 !Aphc2h4=c6h5+c2h4 1.000E+14 0.00 35000.0 !  
 RTI 07/10/2000

Aphc2h4=styren+h 3.790E+06 1.99 32106.0 !  
 Tokmakov  
 rev / 1.630E+06 2.16 1994.0/  
 c6h5+c2h4=Aphc2h4 4.040E+03 2.64 1459.0 !  
 Tokmakov  
 rev / 1.717E+11 0.78 38704.0 /

!Bphc2h4=styren+h 1.800E+13 0.00 47025.0 !  
 EST DEAN  
 Bphc2h4=styren+h 3.740E+08 1.55 44609.0 !  
 Tokmakov  
 rev / 1.188E+07 1.925 -108.0 /

Bphc2h4+c2=styren+ho2 1.580E+12 0.00 15200.0 !  
 Bphc2h4+o=c6h5+ch3hco 1.600E+13 0.00 0.0 !  
 PENGLOAN  
 Bphc2h4+o=phhco+ch3 1.600E+13 0.00 0.0 !  
 PENGLOAN  
 Bphc2h4+oh=phhco+ch4 1.600E+13 0.00 0.0 !  
 PENGLOAN  
 Bphc2h4+ho2=>phhco+ch3+oh 5.000E+12 0.00 0.0 !

PENGLOAN  
 Aphc2h4=Bphc2h4 5.950E+05 2.07 29582.0 !  
 Tokmakov  
 rev / 2.310E+07 1.74 44456.0 /

!\*\*\*\*\*  
 ! styren formation  
 !\*\*\*\*\*

nc4h5+c4h4=styren+h 3.160E+11 0.00 3700.0 !  
 EST nc4h5+pc3h4  
 c4h4+c4h4=styren 1.480E+14 0.00 38003.0 !  
 84LUN/HEI  
 c6h5+c2h3=styren 1.000E+13 0.00 0.0

!c6h5+c2h4=styren+h 1.500E+45 -8.65 42426.7 !  
 EST Tokmakov 100atm  
 c6h5+c2h4=styren+h 3.620E+28 -4.24 23866.3 !  
 Tokmakov latm

!\*\*\*\*\*  
 ! styren reactions  
 !\*\*\*\*\*

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 1) unimolecular intiations  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren=c6h6+c2h2 1.600E+11 0.00 58438.0 !  
 88MUL/TRO

styren=ASTYRYL+h 5.000E+15 0.00 109400.0 !  
 THESE GAELE  
 styren=BSTYRYL+h 5.000E+15 0.00 109400.0 !  
 THESE GAELE

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 2) bimolecular intiations  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren+o2=ASTYRYL+ho2 4.000E+13 0.00 59800.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+o2=BSTYRYL+ho2 4.000E+13 0.00 59800.0 !  
 THESE GAELE

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 3) metathesis reactions  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren+oh=ASTYRYL+h2o 5.000E+12 0.00 6936.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+oh=BSTYRYL+h2o 5.000E+12 0.00 5936.0 !  
 THESE GAELE

styren+h=ASTYRYL+h2 5.000E+13 0.00 15009.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+h=BSTYRYL+h2 5.000E+13 0.00 14009.0 !  
 THESE GAELE

styren+ho2=ASTYRYL+h2o2 7.500E+10 0.00 14190.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+ho2=BSTYRYL+h2o2 7.500E+10 0.00 13190.0 !

THESE GAELE

styren+o=phch2+hco 1.200E+08 1.40 530.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+o=c6h5+ch2hco 6.000E+07 1.40 530.0 !  
 THESE GAELE

styren+c6h5=ASTYRYL+c6h6 2.000E+11 0.00 20000.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+c6h5=BSTYRYL+c6h6 2.000E+11 0.00 19000.0 !  
 THESE GAELE

styren+c6h5o=ASTYRYL+c6h5oh 2.000E+11 0.00 20000.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+c6h5o=BSTYRYL+c6h5oh 2.000E+11 0.00 19000.0 !  
 THESE GAELE

styren+c5h5=ASTYRYL+CPD 2.000E+11 0.00 20000.0 !  
 THESE GAELE  
 styren+c5h5=BSTYRYL+CPD 2.000E+11 0.00 19000.0 !  
 THESE GAELE

styren+oh=c6h4c2h3+h2o 1.630E+07 1.42 1454.0 !  
 MARINOV 1996  
 styren+h=>c6h4c2h3+h2 1.900E+07 2.00 9698.0 !  
 ELLIS 2003

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 4) decomposition by ho2  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

styren+ho2 =>phch2+hco+oh 2.500E+12 1.00 25000.0 !  
 THESE GAELE\*3  
 styren+ho2 =>phhco+ch2+oh 2.500E+12 1.00 25000.0 !  
 THESE GAELE\*3

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
 ! 7) ipso addition  
 !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!styren+h=c6h6+c2h3 7.900E+13 0.00 9990.4 !  
 pas sur mais on va dire que oui  
 styren+h=c6h6+c2h3 2.400E+13 0.00 5123.0 !

!\*\*\*\*\*  
 ! STYRYL radical reactions  
 !\*\*\*\*\*

ASTYRYL+h=BSTYRYL+h 1.000E+14 0.00 0.0 !  
 MARINOV 1996

ASTYRYL=c6h5+c2h2 1.35E+14 0.34 45710.0 !  
 TOKMATOV 2003  
 ASTYRYL=phc2h+h 3.800E+11 0.82 38910.0 !  
 TOKMATOV 2003  
 ASTYRYL+o2=phhco+hco 2.000E+11 0.00 14000.0 !  
 THESE GAELE  
 ASTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6 1.000E+13 0.00 0.0 !  
 THESE GAELE

BSTYRYL+o2=phco+ch2o 2.000E+11 0.00 14000.0 !

THESE GAELE

BSTYRYL+o=c6h5+ch2co 1.600E+13 0.00 0.0 !  
 THESE GAELE  
 BSTYRYL=phc2h+h 1.230E+13 0.55 42580.0 !  
 TOKMATOV 2003  
 BSTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6 1.000E+13 0.00 0.0 !  
 THESE GAELE  
 ASTYRYL= BSTYRYL 4.900E+12 0.45 45740.0 !  
 TOKMATOV 2003  
 rev/ 6.610E+13 0.14 53120.0/ !  
 TOKMATOV 2003  
 BSTYRYL+oh=phc2h+h2o 2.000E+13 0.00 0.0 !  
 MARINOV 1996  
 BSTYRYL+h=phc2h+h2 5.000E+13 0.00 0.0 !  
 MARINOV 1996

!\*\*\*\*\*  
 ! phch2hco reactions  
 !\*\*\*\*\*

phch2hco+o2=>phch2co+ho2 2.000E+13 0.50 42200.0 !  
 =ch3hco  
 phch2hco+ho2=>phch2co+h2o2 4.095E+04 2.50 10204.0 !  
 =ch3hco  
 phch2hco+oh=>phch2co+h2o 2.690E+08 1.35 -1574.0 !  
 =ch3hco  
 phch2hco+o=>phch2co+oh 5.850E+12 0.00 1808.0 !  
 =ch3hco  
 phch2hco+h=>phch2co+h2 4.095E+09 1.16 2404.0 !  
 =ethco  
 phch2hco+ch3=>phch2co+ch4 3.498E-08 6.21 1639.0 !  
 =ethco

phch2hco=>phch2+hco 5.000E+16 0.00 71600.0 !  
 phch2hco+h=c6h6+ch2hco 5.780E+13 0.00 8088.0 !

!\*\*\*\*\*  
 ! phch2co PhenylAcetylene radical reactions  
 !\*\*\*\*\*

phch2co=phch2+co 3.980E+14 0.00 29401.0 !  
 71SOL/BEN2  
 phch2co+o2=phch2co+co2 3.000E+10 0.00 2870.0 !  
 EST/c3h3+o2  
 phch2co+ho2=>phch2co+o+h 2.000E+13 0.00 0.0 !  
 EST/RAD+ho2

c6h5+ch2co=phch2co 3.200E+04 2.40 489.0 !  
 Choi and Lin 2004 ChemPhysChem vol. 5 pp. 225-232

!\*\*\*\*\*  
 ! phcoch2 radical reactions  
 !\*\*\*\*\*

!phcoch2=c6h5+ch2co 2.000E+13 0.00 51940.0 !  
 EstimationSelonDean  
 c6h5+ch2co=phcoch2 6.200E+19 -2.30 15083.0 !  
 Choi and Lin 2004 ChemPhysChem vol. 5 pp. 225-232

!\*\*\*\*\*  
 ! PhenylAcetylene phc2h reactions  
 !\*\*\*\*\*



c10h7ch2oh+o2=c10h7hco+ho2+h 3.000E+14 0.00 41347.99  
c10h7ch2oh+oh=c10h7hco+h2o+h 5.100E+09 1.00 874.35  
c10h7ch2oh+h=c10h7hco+h2+h 1.260E+14 0.00 8401.05  
c10h7ch2oh+h=napht+ch2oh 1.200E+13 0.00 5148.18

!\*\*\*\*\*  
! c10h7hco 1-Naphthalenecarboxaldehyde reactions  
!\*\*\*\*\*

c10h7hco=c10h7co+h 3.980E+15 0.00 83699.33  
c10h7hco+o2=c10h7co+ho2 6.030E+13 0.00 40657.27  
c10h7hco+h2o=c10h7co+h2o2 3.010E+12 0.00 13073.61  
c10h7hco+oh=c10h7co+h2o 7.830E+12 0.00 0.0  
c10h7hco+h=c10h7co+h2 9.200E+10 1.05 3274.38  
c10h7hco+h=napht+hco 1.200E+13 0.00 5148.18  
c10h7hco+o=c10h7co+oh 6.000E+12 0.00 1809.29  
c10h7hco+ch3=c10h7co+ch4 7.826E-08 6.10 1967.29  
c10h7hco+c10h7ch2=c10h7co+c10h7ch3 2.770E+03 2.81 5773.0  
c10h7hco+A2-X=c10h7co+napht 7.010E+11 0.00 4400.10

c10h7co=co+A2-X 3.980E+14 0.00 29397.71

!\*\*\*\*\*  
! c10h7c2h5 1-ethylnaphtalene reactions  
!\*\*\*\*\*

c10h7c2h5+oh=c10h7chch3+h2o 7.090E+06 1.90 -1159.0 !  
idem phc2h5+oh=Bphc2h4  
c10h7c2h5+h=c10h7chch3+h2 3.300E+07 2.00 5346.0 !  
idem phc2h5+h=Bphc2h4  
c10h7c2h5+o2=c10h7chch3+ho2 4.000E+13 0.00 38220.0 !  
idem phc2h5+o2=Bphc2h4  
c10h7c2h5+o=c10h7chch3+oh 5.490E+05 2.50 2140.0 !  
idem phc2h5+o=Bphc2h4  
c10h7c2h5+ch3=c10h7chch3+ch4 7.505E-01 3.46 4485.0 !  
idem phc2h5+ch3=Bphc2h4  
c10h7c2h5+A2-X=c10h7chch3+napht 7.505E-01 3.46 4485.0 !  
idem phc2h5+ch3=Bphc2h4  
c10h7c2h5+c10h7ch2=c10h7chch3+c10h7ch3 7.505E-01 3.46 4485.0 !  
idem phc2h5+ch3=Bphc2h4

c10h7chch3+h+c10h7c2h3 estimation selon Dean 1.800E+13 0.00 48233.0 !

c10h7c2h3+h=A2R5+h2+h 1.260E+14 0.00 8401.05  
c10h7c2h3+oh=A2R5+h2o+h 5.180E+09 1.00 874.35  
c10h7c2h3+o2=A2R5+ho2+h 3.000E+14 0.00 41347.99

!A2R5+oh=>napht+hcco 1.000E+13 0.00 0.00

!\*\*\*\*\*  
! c6h4c2h3 radical reactions  
!\*\*\*\*\*

c10h7ch2+o2=c10h7ch2o2 2.430E+39 -8.96 8620.0  
!c10h7ch2o2=c10h7cho2h 1.947E+10 1.00 34940.0 !  
calculées selon les paramètres Exgas  
c10h7ch2o2=c10h7cho2h 1.290E+10 0.79 31810.0 !  
idem phc2o2=phcho2h Canneaux et al. J. Phys. Chem. A 2008

c10h7ch2o2+c10h7ch3=c10h7ch2o2h+c10h7ch2 3.240E+11 0.00 14900.0 !  
idem c3h6+c10h7ch2o2

c10h7ch2o2+ch4=c10h7ch2o2h+ch3 1.120E+13 0.00 24640.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+c2h6=c10h7ch2o2h+c2h5 1.700E+13 0.00 20460.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+h2o2=c10h7ch2o2h+ho2 2.400E+12 0.00 10000.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+ho2=c10h7ch2o2h+o2 1.000E+11 0.00 0.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+h2=c10h7ch2o2h+h 3.010E+13 0.00 26030.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+ch2o=c10h7ch2o2h+hco 5.600E+12 0.00 13600.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+c2h4=c10h7ch2o2h+c2h3 1.130E+13 0.00 30430.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+c2h2=c10h7ch2o2h+c2h 1.130E+13 0.00 30430.0 !  
idem c2h4+c10h7ch2o2  
c10h7ch2o2+c6h6=c10h7ch2o2h+c6h5 1.130E+13 0.00 30430.0 !  
idem c2h4+c10h7ch2o2  
c10h7ch2o2+toluen=c10h7ch2o2h+phch2 3.240E+11 0.00 14900.0 !  
idem c3h6+c10h7ch2o2  
c10h7ch2o2+acrol=c10h7ch2o2h+c2h3cco 2.800E+12 0.00 13600.0 !  
Ribaucour  
c10h7ch2o2+c3h6=c10h7ch2o2h+ac3h5 3.240E+11 0.00 14900.0 !  
Ribaucour

c10h7ch2o2+ho2=c10h7ch2o2h+o2 1.000E+11 0.00 0.0 !  
c10h7ch2o2+ch3o2=c10h7ch2o2h+ch3o+o2 1.000E+11 0.00 0.0 !  
c10h7ch2o2+c2h5o2=c10h7ch2o2h+c2h5o+o2 1.000E+11 0.00 0.0 !  
c10h7ch2o2+nc3h7o2=c10h7ch2o2h+nc3h7o+o2 1.000E+11 0.00 0.0 !  
c10h7ch2o2+c10h7ch2o2=c10h7ch2o2+c10h7ch2o2+o2 1.000E+11 0.00 0.0 !

c10h7ch2o2h=c10h7ch2o+h 1.723E+20 -1.58 46050.0 !  
c10h7cho2h=c10h7hco+oh 3.000E+11 0.00 22000.0 !  
Ribaucour

c10h7ch2o=c10h7hco+h 1.300E+14 0.00 1100.0 !  
idem phc2o=phhco+H

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
nc10h22+phch2=Ac10h21+toluen 7.940E+11 0.00 20500.0 !  
nc10h22+phch2=Bc10h21+toluen 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
nc10h22+phch2=Cc10h21+toluen 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
nc10h22+phch2=Dc10h21+toluen 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
nc10h22+phch2=Ec10h21+toluen 7.940E+11 0.00 16200.0 !

c10h21qA+phch2=c10h21qJA+toluen 1.050E+11 0.00 9500.0 !  
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o  
c10h21qB+phch2=c10h21qJB+toluen 1.050E+11 0.00 9500.0 !  
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o  
c10h21qC+phch2=c10h21qJC+toluen 1.050E+11 0.00 9500.0 !  
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o  
c10h21qD+phch2=c10h21qJD+toluen 1.050E+11 0.00 9500.0 !  
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o  
c10h21qE+phch2=c10h21qJE+toluen 1.050E+11 0.00 9500.0 !  
idem phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o

nc10h22+c6h5=Ac10h21+c6h6 7.940E+11 0.00 20500.0 !  
nc10h22+c6h5=Bc10h21+c6h6 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
nc10h22+c6h5=Cc10h21+c6h6 7.940E+11 0.00 16200.0 !

nc10h22+c6h5=Dc10h21+c6h6 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
nc10h22+c6h5=Ec10h21+c6h6 7.940E+11 0.00 16200.0 !

nc10h22+c10h7ch2=Ac10h21+c10h7ch3 7.50E+11 0.00 8000.0 !  
Andrae  
nc10h22+c10h7ch2=Bc10h21+c10h7ch3 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae  
nc10h22+c10h7ch2=Cc10h21+c10h7ch3 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae  
nc10h22+c10h7ch2=Dc10h21+c10h7ch3 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae  
nc10h22+c10h7ch2=Ec10h21+c10h7ch3 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae

c10h7ch3+c10h21qJA=c10h7ch2+c10h21qA 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch3+c10h21qJB=c10h7ch2+c10h21qB 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch3+c10h21qJC=c10h7ch2+c10h21qC 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch3+c10h21qJD=c10h7ch2+c10h21qD 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch3+c10h21qJE=c10h7ch2+c10h21qE 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae

c10h7ch2+c10h21qJA=c10h7ch2o+c10h21oJA 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch2+c10h21qJB=c10h7ch2o+c10h21oJB 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch2+c10h21qJC=c10h7ch2o+c10h21oJC 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch2+c10h21qJD=c10h7ch2o+c10h21oJD 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae  
c10h7ch2+c10h21qJE=c10h7ch2o+c10h21oJE 3.0E+12 0.00 12000.0 !  
Andrae

c10h7hco+c10h21qJA=c10h7co+c10h21qA 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+c10h21qJB=c10h7co+c10h21qB 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+c10h21qJC=c10h7co+c10h21qC 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+c10h21qJD=c10h7co+c10h21qD 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+c10h21qJE=c10h7co+c10h21qE 3.00E+12 0.0 17000.0

!A2oh+ho2=A2oh+h2o2 6.800E+13 0.00 10000.0 !  
ESTIMEE inspiree =c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2

!napht+ho2=>A2-X+h2o2 .8620E+06 2.0 20572.64 !  
5.400E+04 2.50 0.0 ! Scott Walker C&F 2002 =c6h6+ho2  
!A2-X+h2o2=> napht+ho2 .6831E+04 2.0 -377.36 !

!phc2h+ho2=c6h4c2h+h2o2 5.400E+04 2.50 27620.0 !  
Scott Walker C&F 2002 =c6h6+ho2

!c10h7ch2+ho2=A2-X+ch2o+oh 8.000E+13 0.00 0.0 !  
!phc2h+ho2=phc2h+ho2 3.000E+13 0.00 15000.0 !  
c=c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2  
!c10h7ch2+ho2=A2-X+ch2o+oh 1.666E+14 0.00 0.0 !

!c10h7ch2oh+ho2=c10h7ch2o+h2o2 6.800E+13 0.00 10000.0 !  
c=c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2  
!c10h7c2h5+ho2=c10h7chch3+h2o2 6.800E+03 2.50 10115.0 !  
Scott 2002=phc2h5+ho2=>Bphc2h4+h2o2

c10h7c2h3+ho2=>A2R5+h2o2+h 6.800E+03 2.50

10115.0 ! Scott 2002=phc2h5+ho2=>Bphc2h4+h2o2  
c10h7c2h3+ho2 =>c10h7ch2+hco+oh 2.500E+12 1.00  
25000.0 ! THESE GALLE\*3= styren+ho2  
c10h7c2h3+ho2 =>c10h7hco+ch2+oh 2.500E+12 1.00  
25000.0 ! THESE GALLE\*3

c10h7hco+Ac10h21=c10h7co+nc10h22 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+Bc10h21=c10h7co+nc10h22 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+Cc10h21=c10h7co+nc10h22 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+Dc10h21=c10h7co+nc10h22 3.00E+12 0.0 17000.0  
c10h7hco+Ec10h21=c10h7co+nc10h22 3.00E+12 0.0 17000.0

phch2+c10h21qJA=phch2o+c10h21oJA 3.0E+12 0.00 12000.0  
phch2+c10h21qJB=phch2o+c10h21oJB 3.0E+12 0.00 12000.0  
phch2+c10h21qJC=phch2o+c10h21oJC 3.0E+12 0.00 12000.0  
phch2+c10h21qJD=phch2o+c10h21oJD 3.0E+12 0.00 12000.0  
phch2+c10h21qJE=phch2o+c10h21oJE 3.0E+12 0.00 12000.0

c6h5+c10h21qJA=c6h5o+c10h21oJA 3.0E+12 0.00 12000.0  
c6h5+c10h21qJB=c6h5o+c10h21oJB 3.0E+12 0.00 12000.0  
c6h5+c10h21qJC=c6h5o+c10h21oJC 3.0E+12 0.00 12000.0  
c6h5+c10h21qJD=c6h5o+c10h21oJD 3.0E+12 0.00 12000.0  
c6h5+c10h21qJE=c6h5o+c10h21oJE 3.0E+12 0.00 12000.0

indeny1+c10h21qJA=indenoxy+c10h21oJA 7.50E+11 0.00 9000.0 !  
Andrae  
indeny1+c10h21qJB=indenoxy+c10h21oJB 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae  
indeny1+c10h21qJC=indenoxy+c10h21oJC 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae  
indeny1+c10h21qJD=indenoxy+c10h21oJD 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae  
indeny1+c10h21qJE=indenoxy+c10h21oJE 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
Andrae

A2-X+c10h21qJA=A2o+c10h21oJA 4.0E+12 0.00 14000.0  
A2-X+c10h21qJB=A2o+c10h21oJB 3.0E+12 0.00 12000.0  
A2-X+c10h21qJC=A2o+c10h21oJC 3.0E+12 0.00 12000.0  
A2-X+c10h21qJD=A2o+c10h21oJD 3.0E+12 0.00 12000.0  
A2-X+c10h21qJE=A2o+c10h21oJE 3.0E+12 0.00 12000.0

A2-X+nc10h22=Ac10h21+napht 7.940E+11 0.00 20500.0 !  
A2-X+nc10h22=Bc10h21+napht 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
A2-X+nc10h22=Cc10h21+napht 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
A2-X+nc10h22=Dc10h21+napht 7.940E+11 0.00 16200.0 !  
A2-X+nc10h22=Ec10h21+napht 7.940E+11 0.00 16200.0 !

!nc9h20+c10h7ch2=Ac9h19+c10h7ch3 ! 7.50E+11 0.00 8000.0 !  
!nc9h20+c10h7ch2=Bc9h19+c10h7ch3 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
!nc9h20+c10h7ch2=Cc9h19+c10h7ch3 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
!nc9h20+c10h7ch2=Dc9h19+c10h7ch3 5.0E+11 0.00 7000.0 !  
!nc9h20+c10h7ch2=Ec9h19+c10h7ch3 2.50E+11 0.00 7000.0 !

!c10h7ch3+c9h19qJA=c10h7ch2+c9h19qA 3.0E+12 0.00 12000.0  
!c10h7ch3+c9h19qJB=c10h7ch2+c9h19qB 3.0E+12 0.00 12000.0  
!c10h7ch3+c9h19qJC=c10h7ch2+c9h19qC 3.0E+12 0.00 12000.0  
!c10h7ch3+c9h19qJD=c10h7ch2+c9h19qD 3.0E+12 0.00 12000.0  
!c10h7ch3+c9h19qJE=c10h7ch2+c9h19qE 3.0E+12 0.00 12000.0

!c10h7ch2+c9h19qJA=c10h7ch2o+c9h19oJA 3.0E+12 0.00 12000.0  
!c10h7ch2+c9h19qJB=c10h7ch2o+c9h19oJB 3.0E+12 0.00 12000.0  
!c10h7ch2+c9h19qJC=c10h7ch2o+c9h19oJC 3.0E+12 0.00 12000.0



mo+h2o2=mo+mj+h2o2	9.640e+10	0.00	1.258e+04	!(TSANG
87)				
mo+hco=mo8j+ch2o	1.020e+05	2.50	1.850e+04	!ST
mo+hco=mo7j+ch2o	1.080e+07	1.90	1.700e+04	!ST
mo+hco=mo6j+ch2o	1.080e+07	1.90	1.700e+04	!ST
mo+hco=mo5j+ch2o	1.080e+07	1.90	1.700e+04	!ST
mo+hco=mo4j+ch2o	1.080e+07	1.90	1.700e+04	!ST
mo+hco=mo3j+ch2o	1.080e+07	1.90	1.700e+04	!ST
mo+hco=mo2j+ch2o	1.140e+09	1.30	1.550e+04	!ST
mo+hco=mo1j+ch2o	1.020e+05	2.50	1.850e+04	!ST
mo+ch3=mo8j+ch4	4.520e-01	3.65	7.154e+03	!2 anc7,
primary f				
mo+ch3=mo7j+ch4	2.705e+04	2.26	7.287e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3=mo6j+ch4	2.705e+04	2.26	7.287e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3=mo5j+ch4	2.705e+04	2.26	7.287e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3=mo4j+ch4	2.705e+04	2.26	7.287e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3=mo3j+ch4	2.705e+04	2.26	7.287e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3=mo2j+ch4	1.000e+11	0.00	7.300e+03	!
mo+ch3=mo1j+ch4	4.520e-01	3.65	7.154e+03	!2 anc7,
primary f				
mo+ch3o=mo8j+ch3oh	1.581e+11	0.00	7.000e+03	!2 rnc7,
primary:				
mo+ch3o=mo7j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3o=mo6j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3o=mo5j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3o=mo4j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3o=mo3j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch3o=mo2j+ch3oh	1.780e+12	0.00	1.200e+03	!
mo+ch3o=mo1j+ch3oh	1.581e+11	0.00	7.000e+03	!2 rnc7,
primary:				
mo+ch2oh=mo8j+ch3oh	1.581e+11	0.00	7.000e+03	!2 rnc7,
primary:				
mo+ch2oh=mo7j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch2oh=mo6j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch2oh=mo5j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch2oh=mo4j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch2oh=mo3j+ch3oh	1.095e+11	0.00	5.000e+03	!2 anc7,
secondary				
mo+ch2oh=mo2j+ch3oh	3.600e+01	2.95	1.000e+04	!
mo+ch2oh=mo1j+ch3oh	1.581e+11	0.00	7.000e+03	!2 rnc7,
primary:				
mo+ch3o2=mo8j+ch3o2h	8.400e+12	0.00	2.044e+04	!2
corrected to ag				
mo+ch3o2=mo7j+ch3o2h	5.600e+12	0.00	1.769e+04	!2
corrected to ag				
mo+ch3o2=mo6j+ch3o2h	5.600e+12	0.00	1.769e+04	!2
corrected to ag				
mo+ch3o2=mo5j+ch3o2h	5.600e+12	0.00	1.769e+04	!2
corrected to ag				
mo+ch3o2=mo4j+ch3o2h	5.600e+12	0.00	1.769e+04	!2

corrected to ag				
mo+ch3o2=mo3j+ch3o2h	5.600e+12	0.00	1.769e+04	!2
corrected to ag				
mo+ch3o2=mo2j+ch3o2h	6.400e+03	2.60	1.240e+04	!2 same
as ho2				
mo+ch3o2=mo1j+ch3o2h	8.400e+12	0.00	2.044e+04	!2
corrected to ag				
mo+c2h3=mo8j+c2h4	5.010e+11	0.00	1.800e+04	!2 rnc7,
primary:				
mo+c2h3=mo7j+c2h4	4.000e+11	0.00	1.680e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h3=mo6j+c2h4	4.000e+11	0.00	1.680e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h3=mo5j+c2h4	4.000e+11	0.00	1.680e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h3=mo4j+c2h4	4.000e+11	0.00	1.680e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h3=mo3j+c2h4	4.000e+11	0.00	1.680e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h3=mo2j+c2h4	4.000e+11	0.00	1.430e+04	!2 rnc7
, tertiary				
mo+c2h3=mo1j+c2h4	5.010e+11	0.00	1.800e+04	!2 rnc7
**, primary				
mo+c2h5=mo8j+c2h6	5.010e+10	0.00	1.340e+04	!2 rnc7,
primary:				
mo+c2h5=mo7j+c2h6	5.000e+10	0.00	1.040e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h5=mo6j+c2h6	5.000e+10	0.00	1.040e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h5=mo5j+c2h6	5.000e+10	0.00	1.040e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h5=mo4j+c2h6	5.000e+10	0.00	1.040e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h5=mo3j+c2h6	5.000e+10	0.00	1.040e+04	!2 rnc7,
secondary				
mo+c2h5=mo2j+c2h6	2.200e+00	3.50	4.140e+03	!
mo+c2h5=mo1j+c2h6	5.010e+10	0.00	1.340e+04	!2 rnc7
**, primary				
mo+ac3h5=mo8j+c3h6	1.200e+02	3.30	1.984e+04	!ST
mo+ac3h5=mo7j+c3h6	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+ac3h5=mo6j+c3h6	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+ac3h5=mo5j+c3h6	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+ac3h5=mo4j+c3h6	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+ac3h5=mo3j+c3h6	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+ac3h5=mo2j+c3h6	8.000e+01	3.30	1.717e+04	!ST
mo+ac3h5=mo1j+c3h6	1.200e+02	3.30	1.984e+04	!ST
mo+mo2j=mo8j+mo	1.200e+02	3.30	1.984e+04	!ST
mo+mo2j=mo7j+mo	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+mo2j=mo6j+mo	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+mo2j=mo5j+mo	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+mo2j=mo4j+mo	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+mo2j=mo3j+mo	8.000e+01	3.30	1.817e+04	!ST
mo+mo2j=mo2j+mo	1.200e+02	3.30	1.984e+04	!ST
mo+mo2j=mo1j+mo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo8oo=mo7j+mo8oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo8oo=mo6j+mo8oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo8oo=mo5j+mo8oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo8oo=mo4j+mo8oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo8oo=mo3j+mo8oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new

reaction pe				
mo+mo8oo=mo2j+mo8oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo8oo=mo1j+mo8oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo7oo=mo8j+mo7oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo7oo=mo7j+mo7oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo7oo=mo6j+mo7oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo7oo=mo5j+mo7oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo7oo=mo4j+mo7oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo7oo=mo3j+mo7oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo7oo=mo2j+mo7oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo7oo=mo1j+mo7oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo6oo=mo8j+mo6oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo6oo=mo7j+mo6oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo6oo=mo6j+mo6oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo6oo=mo5j+mo6oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo6oo=mo4j+mo6oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo6oo=mo3j+mo6oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo6oo=mo2j+mo6oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo6oo=mo1j+mo6oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo5oo=mo8j+mo5oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo5oo=mo7j+mo5oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo5oo=mo6j+mo5oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo5oo=mo5j+mo5oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo5oo=mo4j+mo5oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo5oo=mo3j+mo5oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo5oo=mo2j+mo5oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo5oo=mo1j+mo5oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo4oo=mo8j+mo4oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo4oo=mo7j+mo4oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo4oo=mo6j+mo4oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo4oo=mo5j+mo4oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo4oo=mo4j+mo4oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo4oo=mo3j+mo4oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo4oo=mo2j+mo4oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo4oo=mo1j+mo4oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				

mo+mo3oo=mo8j+mo3oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo3oo=mo7j+mo3oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo3oo=mo6j+mo3oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo3oo=mo5j+mo3oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo3oo=mo4j+mo3oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo3oo=mo3j+mo3oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo3oo=mo2j+mo3oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo3oo=mo1j+mo3oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo2oo=mo8j+mo2oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo2oo=mo7j+mo2oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo2oo=mo6j+mo2oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo2oo=mo5j+mo2oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo2oo=mo4j+mo2oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo2oo=mo3j+mo2oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo2oo=mo2j+mo2oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo2oo=mo1j+mo2oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo1oo=mo8j+mo1oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo1oo=mo7j+mo1oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo1oo=mo6j+mo1oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo1oo=mo5j+mo1oo	1.867e+12	0.00	1.769e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo1oo=mo4j+mo1oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo1oo=mo3j+mo1oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
mo+mo1oo=mo2j+mo1oo	1.000e+12	0.00	1.455e+04	!
mo+mo1oo=mo1j+mo1oo	2.800e+12	0.00	2.044e+04	!2 new
reaction pe				
!!!!				
!mo8j+o2=mo8oo	9.000e+18	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (Ks)				
!mo7j+o2=mo7oo	1.700e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 14				







anc7, alk to te  
 ethco+mpes5j=mo6o  
 to te 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18 anc7, alk  
 c2h5+mhx6\*o=mo6o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 nc3h7hco+mb4j=mo5o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 nc3h7mpes5\*o=mo5o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 nc4h9hco+mp3j=mo4o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 pc4h9+mb4\*o=mo4o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 c5h11hco+me2j=mo3o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 Ac5h11+mp3\*o=mo3o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18 anc7, alk  
 to te  
 c6h13hco+ch3co2=mo2o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 Ac6h13+me2\*o=mo2o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18 anc7, alk  
 to te  
 ch2o+aoaj=mo2o 1.500e+11 0.00 1.190e+04 !18  
 anc7, alk to te  
 mo8\*o+h=mo8o 6.628e+09 1.11 4.226e+03 !18  
 anist: calculat  
 mom\*o+h=mo2o 6.628e+09 1.11 4.226e+03 !18  
 anist: calculat  
 !!!!!  
 mo7d+ho2=mo8ooh7j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo7d+ho2=mo7ooh8j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo6d+ho2=mo7ooh6j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo6d+ho2=mo6ooh7j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo5d+ho2=mo6ooh5j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo5d+ho2=mo5ooh6j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo4d+ho2=mo5ooh4j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo4d+ho2=mo4ooh5j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo3d+ho2=mo4ooh3j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo3d+ho2=mo3ooh4j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo2d+ho2=mo3ooh2j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo2d+ho2=mo2ooh3j 1.500e+11 0.00 7.800e+03 !Curran  
 et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
 mo8ooh6j=>mhx6d+ch2o+oh 2.000e+13 0.00 3.100e+04 !  
 mo8ooh5j=>mhx5d+c2h4o2h 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo8ooh4j=>mhx4d+c3h6ooh1-3 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo7ooh5j=>mhx5d+ch3hco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo7ooh4j=>mpes4d+c3h6ooh2-1 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo7ooh3j=>mhx3d+c2h4+ch3hco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo6ooh8j=>mhx6\*o+c2h4+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo6ooh4j=>mpes4d+ethco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo6ooh3j=>mhx3d+c4h8+ho2 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo6ooh2j=>mpes2d+c2h4+ethco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo5ooh8j=>mhx5ooh6j+c2h4 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo5ooh7j=>mpes5\*o+c3h6+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !

mo5ooh3j=>mhx3d+nc3h7hco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo5ooh2j=>mpes2d+c5h10+ho2 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo4ooh8j=>mhx4ooh6j+c2h4 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo4ooh7j=>mpes4d+c3h6+ho2 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo4ooh6j=>mb4\*o+c4h8+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo4ooh2j=>mpes2d+nc4h9hco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo3ooh7j=>mp3\*o+c2h4+c3h6 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo3ooh6j=>mhx3ooh4j+c4h8 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo3ooh5j=>mp3\*o+c5h10+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo2ooh6j=>mhx2ooh4j+c4h8 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo2ooh5j=>mpes2d+c5h10+ho2 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo2ooh4j=>me2\*o+c6h12-1+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo2oohm7j=>ch2o+co+c6h13hco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 mo2oohm2j=>ch2o+c7h14co+ho2 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
 !!!!!  
 mo8ooh6j=>mocycy8o6+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo8ooh5j=>mocycy8o5+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo8ooh4j=>mocycy8o4+oh 1.700e+08 0.00 1.950e+03 !Battin-  
 Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
 mo7ooh5j=>mocycy7o5+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo7ooh4j=>mocycy7o4+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo7ooh3j=>mocycy7o3+oh 1.700e+08 0.00 1.950e+03 !Battin-  
 Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
 mo6ooh6j=>mocycy6o6+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo6ooh4j=>mocycy6o4+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo6ooh3j=>mocycy6o3+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo6ooh2j=>mocycy6o2+oh 1.700e+08 0.00 1.950e+03 !Battin-  
 Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
 mo5ooh8j=>mocycy5o8+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo5ooh7j=>mocycy5o7+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo5ooh6j=>mocycy5o6+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo5ooh5j=>mocycy5o5+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo5ooh4j=>mocycy5o4+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo5ooh3j=>mocycy5o3+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo5ooh2j=>mocycy5o2+oh 1.700e+08 0.00 1.950e+03 !Battin-  
 Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
 mo4ooh8j=>mocycy4o8+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo4ooh7j=>mocycy4o7+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo4ooh6j=>mocycy4o6+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo4ooh5j=>mocycy4o5+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo4ooh4j=>mocycy4o4+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Battin-  
 Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
 mo4ooh3j=>mocycy4o3+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo4ooh2j=>mocycy4o2+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo3ooh7j=>mocycy3o7+oh 1.700e+08 0.00 1.950e+03 !Battin-  
 Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
 mo3ooh6j=>mocycy3o6+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo3ooh5j=>mocycy3o5+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo3ooh4j=>mocycy3o4+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Battin-  
 Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)  
 mo2ooh5j=>mocycy2o5+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo2ooh4j=>mocycy2o4+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
 mo2oohm7j=>mocycy2o7+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et

al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 mo6ooh2j=>mocycy2o6+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et  
 al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
 !!!!!  
 mocycy8o6+oh=>mhx6j\*o+c2h4+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o6+oh=>mhx6d+hco+h2 4.800e+08 1.50 2.785e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o5+oh=>mhx6j5\*o+c2h4+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o5+oh=>mhx5d+ch2hco+h2 4.800e+08 1.50 2.785e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o4+oh=>mhx6j4\*o+c2h4+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o4+oh=>mpes4d+ch2ch2hco+h2 4.800e+08 1.50 2.785e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o5+oh=>mpes5j\*o+c3h6+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o5+oh=>mhx5d+ch3co+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o4+oh=>mpes5j4\*o+c3h6+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o4+oh=>mpes4d+ch2coch3+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o3+oh=>mpes5j3\*o+c3h6+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o3+oh=>mhx3d+ch3coc2h4p+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o4+oh=>mb4j\*o+c4h8+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o4+oh=>mpes4d+c2h5co+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o3+oh=>mb4j3\*o+c4h8+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o3+oh=>mhx3d+c2h5coch2+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o2+oh=>mpes2d+c2h5coc2h4p+h2 9.600e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy5o3+oh=>mp3j\*o+c5h10+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy5o3+oh=>mhx3d+c3h7co+h2 2.400e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy5o2+oh=>mp2d+nc3h7coch2+h2 9.600e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy4o2+oh=>mp2d+nc4h9co+h2 9.600e+08 1.50 2.005e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy2om+h=>c7h14co+ocho+h2 1.920e+09 1.50 2.785e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy8o6+oh=>mhx6j\*o+c2h4+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o6+oh=>mhx6d+hco+h2o 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o5+oh=>mhx6j5\*o+c2h4+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o5+oh=>mhx5d+ch2hco+h2o 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o4+oh=>mhx6j4\*o+c2h4+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy8o4+oh=>mpes4d+ch2ch2hco+h2o 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o5+oh=>mpes5j\*o+c3h6+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o5+oh=>mhx5d+ch3co+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet

mocycy7o4+oh=>mpes5j4\*o+c3h6+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o4+oh=>mpes4d+ch2coch3+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o3+oh=>mpes5j3\*o+c3h6+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy7o3+oh=>mhx3d+ch3coc2h4p+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o4+oh=>mb4j\*o+c4h8+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o4+oh=>mpes4d+c2h5co+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o3+oh=>mb4j3\*o+c4h8+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o3+oh=>mhx3d+c2h5coc2+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy6o2+oh=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2o 4.800e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy5o3+oh=>mp3j\*o+c5h10+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy5o3+oh=>mhx3d+c3h7co+h2o 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet  
 mocycy5o2+oh=>mp2d+nc3h7coch2+h2o 4.800e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy4o2+oh=>mp2d+nc4h9co+h2o 4.800e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy2om+oh=>c7h14co+ocho+h2o 9.600e+06 2.00 -1.192e+03 !25  
 dbr, see sheet\*4  
 mocycy8o6+oh=>mhx6j\*o+c2h4+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy8o6+oh=>mhx6d+hco+h2o2 4.000e+12 0.00 1.440e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy8o5+oh=>mhx6j5\*o+c2h4+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy8o5+oh=>mhx5d+ch2hco+h2o2 4.000e+12 0.00 1.440e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy8o4+oh=>mhx6j4\*o+c2h4+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy8o4+oh=>mpes4d+ch2ch2hco+h2o2 4.000e+12 0.00 1.440e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy7o5+oh=>mpes5j\*o+c3h6+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy7o5+oh=>mhx5d+ch3co+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy7o4+oh=>mpes5j4\*o+c3h6+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy7o4+oh=>mpes4d+ch2coch3+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy7o3+oh=>mpes5j3\*o+c3h6+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy7o3+oh=>mhx3d+ch3coc2h4p+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy6o4+oh=>mb4j\*o+c4h8+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy6o4+oh=>mpes4d+c2h5co+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy6o3+oh=>mb4j3\*o+c4h8+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy6o3+oh=>mhx3d+c2h5coc2+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan  
 mocycy6o2+oh=>mp2d+c2h5coc2h4p+h2o2 8.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan\*4  
 mocycy5o3+oh=>mp3j\*o+c5h10+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 !25  
 my evans-polyan



mo6ooh2\*o=>mpe5j2\*o+ethco+ch 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177

mo5ooh2\*o=>mb4j2\*o+nc3h7hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 ! Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177

mo4ooh2\*o=>mp3j2\*o+nc4h9hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 ! Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177

mo3ooh2\*o=>me2j\*o+nc5h11hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 ! Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177

momooh2\*o=>oac2j\*o+ch2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 ! Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177

mo2oohm\*o=>chooco+c6h13hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 ! Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177

!!!!!!

mo7d+o=mo7d6j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+o=mo7d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+h=mo7d6j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+h=mo7d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+oh=mo7d6j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+oh=mo7d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+ho2=mo7d6j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+ho2=mo7d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo7d+ch3o=mo7d6j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

mo7d+ch3o=mo7d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

!mo7d+oh=ch2o+mhp7j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

!mo7d+oh=ch3+mhp7\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

mo7d = me2j + Fc6h11-1 2.500E+16 0.0

68000.0 !

mo7d = mp3j + c5h915 1.000E+16 0.0

71000.0 !

mo7d = mb4j + c4h7 1.000E+16 0.0

71000.0 !

mo7d = mpe5j + ac3h5 1.000E+16 0.0

71000.0 !

c2h3 + mhx6j = mo7d 1.000E+13 0.0

0.0 !

mo7d + o2 = mo7d6j + ho2 4.000E+12 0.0

37000.0 !

mo7d + o2 = mo7d2j + ho2 4.000E+13 0.0

37000.0 !as mo+o2=mo2j+ho2

!mo7d + ch3 = mo7d6j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

!mo7d + ch3 = mo7d2j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

!mo7d + o = mhp7j + hco 1.000E+11 0.0 -

1050.0 !Mohammed (curran2000)

mo7d6j + h = mo7d 1.000E+13 0.0

0.0 ! (RTi)

mo7d6j=c4h6+mb4j 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

mo7d2j=c5h915+mp2d 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard

et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

c7h12co+ch3o=mo7d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3 anc7 :oh+c3h6=c

!!!!!!

mo6d+o=mo6d5j+oh 1.740e+11 0.70 5.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)

mo6d+o=mo6d5j+oh 1.740e+11 0.70 5.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+o=mo6d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+h=mo7d6j+h2 1.740e+05 2.50 2.510e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp)

mo6d+h=mo6d5j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+h=mo6d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+oh=mo7d6j+h2o 3.000e+06 2.00 -2.980e+02 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp)

mo6d+oh=mo6d5j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+oh=mo6d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+ho2=mo7d6j+h2o2 9.600e+03 2.60 1.390e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp)

mo6d+ho2=mo6d5j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+ho2=mo6d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo6d+ch3o=mo7d6j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (3Hp ally)

mo6d+ch3o=mo6d5j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

mo6d+ch3o=mo6d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

!mo6d+oh=ch3hco+mhx6j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

!mo6d+oh=c2h5+mhx6\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

mo6d + o2 = mo6d5j + ho2 4.000E+12 0.0

37000.0 !

mo6d + o2 = mo7d6j + ho2 6.000E+12 0.0

37000.0 !

mo6d + o2 = mo6d2j + ho2 4.000E+13 0.0

37000.0 !as mo+o2=mo2j+ho2

!mo6d + ch3 = mo6d5j + ch4 2.210E+00 3.5

5670.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)

!mo6d + ch3 = mo7d6j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

!mo6d + ch3 = mo6d2j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

mo6d5j + h = mo6d 1.000E+13 0.0

0.0 ! (RTi)

mo6d + o = mhx6j + ch3co 1.000E+11 0.0 -

1050.0 !Mohammed (curran2000)

mo6d5j=c5h8-13+mp3j 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

mo6d2j=Cc5h9-1+mp2d 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

c7h12co+ch3o=mo6d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3 anc7 :oh+c3h6=c

!!!!!!

mo5d+o=mo6d5j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+o=mo5d4j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+o=mo5d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+h=mo6d5j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+h=mo5d4j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+h=mo5d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+oh=mo6d5j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+oh=mo5d4j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+oh=mo5d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+ho2=mo6d5j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+ho2=mo5d4j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+ho2=mo5d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo5d+ch3o=mo6d5j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

mo5d+ch3o=mo5d4j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

mo5d+ch3o=mo5d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

!mo5d+oh=ethco+mpe5j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

!mo5d+oh=nc3h7+mpe5\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

mo5d + o2 = mo6d5j + ho2 4.000E+12 0.0

37000.0 !

mo5d + o2 = mo5d4j + ho2 4.000E+12 0.0

37000.0 !

mo5d + o2 = mo5d2j + ho2 4.000E+13 0.0

37000.0 !as mo+o2=mo2j+ho2

!mo5d + ch3 = mo6d5j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

!mo5d + ch3 = mo5d4j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

!mo5d + ch3 = mo5d2j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

mo5d + o = mpe5j + c2h5co 1.000E+11 0.0 -

1050.0 !Mohammed (curran2000)

mo5d4j + h = mo5d 1.000E+13 0.0

0.0 ! (RTi)

mo5d4j=c6h10-13+me2j 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

mo5d4j=mp6d4d+ch3 1.300e+13 0.00 3.820e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (CH3+1,3-diene)

mo5d2j=Cc5h9-1+mp2d 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

c7h12co+ch3o=mo5d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3 anc7 :oh+c3h6=c

!!!!!!

mo4d+o=mo5d4j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+o=mo4d3j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+o=mo4d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+h=mo5d4j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+h=mo4d3j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+h=mo4d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+oh=mo5d4j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+oh=mo4d3j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+oh=mo4d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+ho2=mo5d4j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+ho2=mo4d3j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+ho2=mo4d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo4d+ch3o=mo4d3j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

mo4d+ch3o=mo4d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

mo4d+ch3o=mo4d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

!mo4d+oh=nc3h7hco+mb4j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

!mo4d+oh=pc4h9+mb4\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 ! Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802

mo4d + o2 = mo4d3j + ho2 4.000E+12 0.0

37000.0 !

mo4d + o2 = mo5d4j + ho2 4.000E+12 0.0

37000.0 !

mo4d + o2 = mo4d2j + ho2 4.000E+13 0.0

37000.0 !as mo+o2=mo2j+ho2

!mo4d + ch3 = mo4d3j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

!mo4d + ch3 = mo5d4j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

!mo4d + ch3 = mo4d2j + ch4 1.000E+11 0.0

7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)

mo4d + o = mb4j + c3h7co 1.000E+11 0.0 -

1050.0 !Mohammed (curran2000)

mo4d3j + h = mo4d 1.000E+13 0.0

0.0 ! (RTi)

mo4d3j=c7h12+ch3co2 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (RT+1,3-diene) ! A reprene

mo4d3j=mxh5d3d+c2h5 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

mo4d2j=mp2d+c5h915 1.300e+13 0.00 5.000e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)

c7h12co+ch3o=mo4d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3 anc7 :oh+c3h6=c

!!!!!!

mo3d+o=mo4d3j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)

mo3d+o=mo3d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)











mhpicy7o5+h2o=>mpe5j\*o+c2h4+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o5+h2o=>mhx5d+hco+h2o2 4.000e+12 0.00 1.440e+04 125  
my evans-po  
mhpicy7o4+h2o=>mpe5j4\*o+c2h4+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o4+h2o=>mpe4d+ch2hco+h2o2 4.000e+12 0.00 1.440e+04 125  
my evans-po  
mhpicy7o3+h2o=>mpe5j3\*o+c2h4+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o3+h2o=>mb3d+ch2ch2hco+h2o2 4.000e+12 0.00 1.440e+04 125  
my evans-po  
mhpicy6o4+h2o=>mb4j\*o+c3h6+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o4+h2o=>mpe4d+ch3co+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o3+h2o=>mb4j3\*o+c3h6+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy6o3+h2o=>mb3d+ch2cch3+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o2+h2o=>mp2d+ch3coc2h4p+h2o2 8.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy5o3+h2o=>mp3j\*o+c4h8+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy5o3+h2o=>mb3d+c2h5co+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy5o2+h2o=>mp2d+c2h5cch2+h2o2 8.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy4o2+h2o=>mp2d+c3h7co+h2o2 8.000e+12 0.00 1.426e+04 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy2om+h2o=>c6h12co+ocho+h2o2 1.600e+13 0.00 1.440e+04 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy7o5+ch3o=>mpe5j\*o+c2h4+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o5+ch3o=>mhx5d+hco+ch3oh 2.190e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o4+ch3o=>mpe5j4\*o+c2h4+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o4+ch3o=>mpe4d+ch2hco+ch3oh 2.190e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o3+ch3o=>mpe5j3\*o+c2h4+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o3+ch3o=>mb3d+ch2hco+ch3oh 2.190e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o4+ch3o=>mb4j\*o+c3h6+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o4+ch3o=>mpe4d+ch3co+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o3+ch3o=>mb4j3\*o+c3h6+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o3+ch3o=>mb3d+ch2cch3+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o2+ch3o=>mp2d+ch3coc2h4p+ch3oh 4.380e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy5o3+ch3o=>mp3j\*o+c4h8+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy5o3+ch3o=>mb3d+c2h5co+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan  
mhpicy5o2+ch3o=>mp2d+c2h5cch2+ch3oh 4.380e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy4o2+ch3o=>mp2d+c3h7co+ch3oh 4.380e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy2om+ch3o=>c6h12co+ocho+ch3oh 8.760e+11 0.00 5.000e+03 125  
my evans-polyan\*4

mhpicy7o5+ch3o2=>mpe5j\*o+c2h4+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy7o5+ch3o2=>mhx5d+hco+ch3o2h 4.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o4+ch3o2=>mpe5j4\*o+c2h4+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy7o4+ch3o2=>mpe4d+ch2hco+ch3o2h 4.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy7o3+ch3o2=>mpe5j3\*o+c2h4+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy7o3+ch3o2=>mb3d+ch2ch2hco+ch3o2h 4.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-polyan  
mhpicy6o4+ch3o2=>mb4j\*o+c3h6+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy6o4+ch3o2=>mpe4d+ch3co+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy6o3+ch3o2=>mb4j3\*o+c3h6+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy6o3+ch3o2=>mb3d+ch2cch3+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy6o2+ch3o2=>mp2d+ch3coc2h4p+ch3o2h 8.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy5o3+ch3o2=>mp3j\*o+c4h8+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy5o3+ch3o2=>mb3d+c2h5co+ch3o2h 2.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-poly  
mhpicy5o2+ch3o2=>mp2d+c2h5cch2+ch3o2h 8.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy4o2+ch3o2=>mp2d+c3h7co+ch3o2h 8.000e+12 0.00 1.770e+04 125  
my evans-polyan\*4  
mhpicy2om+ch3o2=>c6h12co+ocho+ch3o2h 1.600e+13 0.00 1.770e+04 125  
my evans-polyan\*4  
!!!!!!  
mhp7ooh6oo=>mhp6ooh7\*o+oh 3.300e+09 1.00 3.550e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)  
mhp7ooh5oo=>mhp5ooh7\*o+oh 5.700e+08 1.00 2.800e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)  
mhp7ooh4oo=>mhp4ooh7\*o+oh 1.000e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)  
mhp7ooh3oo=>mhp3ooh7\*o+oh 1.700e+07 1.00 2.400e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 2Hp)  
mhp6ooh7oo=>mhp7ooh6\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp6ooh5oo=>mhp5ooh6\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp6ooh4oo=>mhp4ooh6\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhp6ooh3oo=>mhp3ooh6\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.200e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)  
mhp6ooh2oo=>mhp2ooh6\*o+oh 8.600e+06 1.00 2.100e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Hs)  
mhp5ooh7oo=>mhp7ooh5\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhp5ooh6oo=>mhp5ooh6\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp5ooh4oo=>mhp4ooh5\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp5ooh3oo=>mhp3ooh5\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhp5ooh2oo=>mhp2ooh5\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.200e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)  
mhp4ooh7oo=>mhp7ooh4\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.200e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)  
mhp4ooh6oo=>mhp6ooh4\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !

Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhp4ooh5oo=>mhp5ooh4\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp4ooh3oo=>mhp3ooh4\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp4ooh2oo=>mhp2ooh4\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhp3ooh7oo=>mhp7ooh3\*o+oh 8.600e+06 1.00 2.100e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Hs)  
mhp3ooh6oo=>mhp6ooh3\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.200e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)  
mhp3ooh5oo=>mhp5ooh3\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhp3ooh4oo=>mhp4ooh3\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp3ooh2oo=>mhp2ooh3\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhp2ooh6oo=>mhp6ooh2\*o+oh 8.500e+06 1.00 1.600e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Ht)-  
2kcal  
mhp2ooh5oo=>mhp5ooh2\*o+oh 5.000e+07 1.00 1.700e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)-  
2kcal  
mhp2ooh4oo=>mhp4ooh2\*o+oh 2.850e+07 1.00 2.000e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Ht)-  
2kcal  
mhp2ooh3oo=>mhp3ooh2\*o+oh 1.650e+09 1.00 2.750e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Ht)-  
2kcal  
mhp2oohmoo=>mhpmooch2\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.170e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+  
2.7poster ECM  
mhpmooch2oo=>mhp2oohm\*o+oh 1.000e+08 1.00 2.850e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+  
3.5poster ECM  
!!!!!!  
mhp6ooh7\*o=>mhx6\*o+hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp5ooh7\*o=>mpe5\*o+c2h2hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp5ooh7\*o=>mb4j+choc2hcho+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp4ooh7\*o=>mb4\*o+c2h2hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp4ooh7\*o=>mp3j+choc2h4cho+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp3ooh7\*o=>mp3\*o+c3h6cho+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp3ooh7\*o=>me2j+choc3h6cho+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp7ooh6\*o=>mhx6\*o+c2h2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp5ooh6\*o=>mpe5\*o+c3h3co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp4ooh6\*o=>mb4\*o+c2cch3+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp4ooh6\*o=>mp3j+c4ald3oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp3ooh6\*o=>me2j+c5ald4oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp2ooh6\*o=>ch3co2+c6ald5oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177

mhp7ooh5\*o=>mhx6j5\*o+c2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp6ooh5\*o=>mpe5j\*o+c3h3co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp4ooh5\*o=>mb4\*o+c2h5co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp3ooh5\*o=>mp3\*o+c2h5cch2+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp3ooh5\*o=>me2j+c5ald3oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp2ooh5\*o=>ch3co2+c6ald4oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp7ooh4\*o=>mhx6j4\*o+c2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp6ooh4\*o=>mpe5j4\*o+c3h3co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp5ooh4\*o=>mpe5\*o4\*o+c2h5co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp5ooh4\*o=>mb4j\*o+ethco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp3ooh4\*o=>mp3\*o+c3h7co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp2ooh4\*o=>ch3co2+c6ald3oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp7ooh3\*o=>mhx6j3\*o+c2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp6ooh3\*o=>mpe5j3\*o+c3h3co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp5ooh3\*o=>mb4j3\*o+ethco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp4ooh3\*o=>mp3j\*o+c3h7hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp2ooh3\*o=>ch3co2+c4h9cocho+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp6ooh2\*o=>mpe5j2\*o+c3h3co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp5ooh2\*o=>mb4j2\*o+ethco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp4ooh2\*o=>mp3j2\*o+nc3h7hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp3ooh2\*o=>me2j\*o+nc4h9hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhpmooch2\*o=>hpaoo2\*o+c2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhp2oohm\*o=>occo+c5h11hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
!!!!!!  
mhp6d+o=>mhp6d5j+oh 8.800e+10 0.7 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+o=>mhp6d2j+oh 8.800e+10 0.7 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+o=>mhp6d5j+h2o 5.400e+04 2.5 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+h=>mhp6d2j+h2o 5.400e+04 2.5 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+o=>mhp6d5j+h2o 3.000e+06 2.0 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+o=>mhp6d2j+h2o 3.000e+06 2.0 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+h2o=>mhp6d5j+h2o 6.400e+03 2.6 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+h2o=>mhp6d2j+h2o 6.400e+03 2.6 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mhp6d+ch3o=>mhp6d5j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !

Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp6d+ch3o=mhp6d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp6d+oh=ch3hco+mpe5j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp6d+oh=mhx6j+ch2o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp6d = me2j + c5h915 2.500E+16 0.0
68000.0 !
mhp6d = mp3j + c4h7 1.000E+16 0.0
71000.0 !
mhp6d = mb4j + ac3h5 1.000E+16 0.0
71000.0 !
c2h3 + mpe5j = mhp6d 1.000E+13 0.0
0.0 !
mhp6d + o2 = mhp6d5j + ho2 4.000E+12 0.0
37000.0 !
mhp6d + o2 = mhp6d2j + ho2 4.000E+13 0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2d+ho2
!mhp6d + ch3 = mhp6d5j + ch4 2.000E+11 0.0
6800.0 ! (WESTB.87)
!mhp6d + ch3 = mhp6d2j + ch4 2.000E+11 0.0
6800.0 ! (WESTB.87)
mhp6d + o = mxh6j + hco 1.000E+11 0.0 -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp6d5j + h = mhp6d 1.000E+13 0.0
0.0 ! (RTI)
mhp6d2j + h = mhp6d 1.000E+13 0.0
0.0 ! (RTI)
mhp6d5j = mp3j + c4h6 1.300e+13 0.00
3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(Rs+1,3-diene)
mhp6d2j = mp2d + c4h7 1.300e+13 0.00
3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(Rs+1,3-diene)
c6h10co+ch3o=mhp6d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp5d+o=mhp6d5j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+o=mhp5d4j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+o=mhp5d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h=mhp6d5j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h=mhp5d4j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h=mhp5d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+oh=mhp6d5j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+oh=mhp5d4j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+oh=mhp5d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h2o=mhp6d5j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h2o=mhp5d4j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+h2o=mhp5d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d+ch3o=mhp6d5j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

mhp5d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp5d+ch3o=mhp5d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp5d+oh=ch3hco+mpe5j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp5d+oh=c2h5+mpe5j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp5d + o2 = mhp5d4j + ho2 4.000E+12 0.0
37000.0 !
mhp5d + o2 = mhp5d2j + ho2 4.000E+13 0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mhp5d + ch3 = mhp5d4j + ch4 1.000E+11 0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
!mhp5d + ch3 = mhp5d2j + ch4 1.000E+11 0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp5d + o = mpe5j + ch3co 1.000E+11 0.0 -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp5d4j + h = mhp5d 1.000E+13 0.0
0.0 ! (RTI)
mhp5d2j + h = mhp5d 1.000E+13 0.0
0.0 ! (RTI)
mhp5d4j=c5h8-13+me2j 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
mhp5d2j=c4h7+mp2d 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)
c6h10co+ch3o=mhp5d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp4d+o=mhp5d4j+oh 1.740e+11 0.70 5.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+o=mhp4d3j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+o=mhp4d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+h=mhp5d4j+h2 1.740e+05 2.50 2.510e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+h=mhp4d3j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+h=mhp4d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+oh=mhp5d4j+h2o 3.000e+06 2.00 -2.980e+02 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+oh=mhp4d3j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+oh=mhp4d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+h2o=mhp5d4j+h2o2 9.600e+03 2.60 1.390e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
mhp4d+h2o=mhp4d3j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+h2o=mhp4d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp4d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp4d+ch3o=mhp4d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp4d+oh=ethco+mb4j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !

Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp4d+oh=nc3h7+mb4j\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp4d + o2 = mhp5d4j + ho2 4.000E+12 0.0
37000.0 !
mhp4d + o2 = mhp4d3j + ho2 4.000E+12 0.0
37000.0 !
mhp4d + o2 = mhp4d2j + ho2 4.000E+13 0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mhp4d + ch3 = mhp5d4j + ch4 2.210E+00 3.5
5670.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)
!mhp4d + ch3 = mhp4d3j + ch4 1.000E+11 0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
!mhp4d + ch3 = mhp4d2j + ch4 1.000E+11 0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp4d + o = mb4j + c2h5co 1.000E+11 0.0 -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp4d3j + h = mhp4d 1.000E+13 0.0
0.0 ! (RTI)
mhp4d3j=c6h10-13+ch3co2 1.300e+13 0.00 3.390e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rt+1,3-diene) ! A reprendre
mhp4d2j=mp2d+c4h7 1.300e+13 0.00 5.000e+04 !
c6h10co+ch3o=mhp4d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp3d+o=mhp4d3j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+o=mhp3d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+h=mhp4d3j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+h=mhp3d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+oh=mhp4d3j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+oh=mhp3d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+h2o=mhp4d3j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+h2o=mhp3d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp3d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
!mhp3d+oh=nc3h7hco+mp3j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp3d+oh=nc4h9+mp3j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
mhp3d + o2 = mhp4d3j + ho2 4.000E+12 0.0
37000.0 !
mhp3d + o2 = mhp3d2j + ho2 4.000E+13 0.0
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2
!mhp3d + ch3 = mhp4d3j + ch4 1.000E+11 0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
!mhp3d + ch3 = mhp3d2j + ch4 1.000E+11 0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp3d + o = mp3j + c3h7co 1.000E+11 0.0 -

1050.0 !Mohammed (curran2000)
mhp3d2j + h = mhp3d 1.000E+13 0.0
0.0 ! (RTI)
mhp3d2j=mpe4d2d+c2h5 2.000e+13 0.00 1.500e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081
(R+cetone/aldehyde)
c6h10co+ch3o=mhp3d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3
anc7 :oh+c3h6=c
!!!!!!
mhp2d+o=mhp3d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp2d+h=mhp3d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp2d+oh=mhp3d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp2d+h2o=mhp3d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp2d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)
mhp2d + o2 = mhp3d2j + ho2 4.000E+12 0.0
37000.0 !
!mhp2d + ch3 = mhp3d2j + ch4 1.000E+11 0.0
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)
mhp2d + o = me2j + nc4h9co 1.000E+11 0.0 -
1050.0 !Mohammed (curran2000)
!mhp2d+oh=nc4h9hco+me2j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!mhp2d+oh=AcSh11+me2j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802
!!!!!!
mhp6d+oh=mhp6oh7j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7 pitz
propene oh
mhp5d+oh=mhp5oh6j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7 pitz
propene oh
mhp4d+oh=mhp4oh5j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7 pitz
propene oh
mhp3d+oh=mhp3oh4j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7 pitz
propene oh
mhp2d+oh=mhp2oh3j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7 pitz
propene oh
mhp6oh7j+o2=mhp6oh7oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7 pitz
propene oh
mhp5oh6j+o2=mhp5oh6oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7 pitz
propene oh
mhp4oh5j+o2=mhp4oh5oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7 pitz
propene oh
mhp3oh4j+o2=mhp3oh4oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7 pitz
propene oh
mhp2oh3j+o2=mhp2oh3oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7 pitz
propene oh
mhp6oh7oo+o2=mhx6j\*o+oh+ch2o 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7
irreversible; p
mhp5oh6oo+mpe5j\*o+oh+ch3hco 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7
irreversible; p
mhp4oh5oo+mb4j\*o+oh+ethco 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7
irreversible; p
mhp3oh4oo+mp3j\*o+oh+nc3h7hco 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7
irreversible; p
mhp2oh3oo+me2j\*o+oh+nc4h9hco 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7
irreversible; p
!!!!!!
hco+mxh6j=mhp7\*o 1.000e+13 0.00 0.000e+00 !9
ALLARA and shaw



!mhx6j+o2=mxh6oo	9.000e+18	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx5j+o2=mxh5oo	1.700e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (kp+ks)			
!mhx4j+o2=mxh4oo	1.800e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (2ks)			
!mhx3j+o2=mxh3oo	1.050e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx2j+o2=mxh2oo	1.200e+10	0.00	-2.300e+03	!
!mhxmj+o2=mxhmoo	4.500e+12	0.00	0.0	!10 nc7;
primary				
!mhxmj+o2=mxhmoo	3.500e+11	0.00	-1700.0	!Dagaut
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001)	61-84			
!mhx6oo5j+o2=mxh6oo5oo	1.800e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (2ks)			
!mhx6oo4j+o2=mxh6oo4oo	1.800e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (2ks)			
!mhx6oo3j+o2=mxh6oo3oo	1.050e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx6oo2j+o2=mxh6oo2oo	1.200e+10	0.00	-2.300e+03	!
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (kt)			
!mhx5oo5j+o2=mxh5oo5oo	1.050e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx5oo4j+o2=mxh5oo4oo	1.050e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx5oo3j+o2=mxh5oo3oo	1.050e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx5oo2j+o2=mxh5oo2oo	1.200e+10	0.00	-2.300e+03	!
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx5oo1j+o2=mxh5oo1oo	1.800e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx4oo5j+o2=mxh4oo5oo	9.500e+18	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (kp+kt)			
!mhx4oo4j+o2=mxh4oo4oo	3.000e+18	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (2kt)			
!mhx4oo3j+o2=mxh4oo3oo	1.200e+10	0.00	-2.300e+03	!
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx4oo2j+o2=mxh4oo2oo	9.000e+18	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx4oo1j+o2=mxh4oo1oo	1.700e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (kp+ks)			
!mhx3oo5j+o2=mxh3oo5oo	1.050e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx3oo4j+o2=mxh3oo4oo	1.050e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx3oo3j+o2=mxh3oo3oo	1.200e+10	0.00	-2.300e+03	!
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx3oo2j+o2=mxh3oo2oo	9.000e+18	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx3oo1j+o2=mxh3oo1oo	1.700e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (kp+ks)			
!mhx2oo5j+o2=mxh2oo5oo	1.800e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (2ks)			
!mhx2oo4j+o2=mxh2oo4oo	1.000e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx2oo3j+o2=mxh2oo3oo	1.000e+19	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks+kt)			
!mhx2oo2j+o2=mxh2oo2oo	9.500e+18	-2.50	0.000e+00	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (ks)			
!mhx2oo1j+o2=mxh2oo1oo	1.200e+10	0.00	-2.300e+03	!
et al., Combust Sci Technol, 165 (2001)	61-84			
!mhxmoo2j+o2=mxhmoo2oo	1.200e+10	0.00	-2.300e+03	!
!!!!!!				
!mhx6j=mxh3j	9.900e+07	1.00	1.730e+04	!Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002)	1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx3j=mxhmj	2.500e+07	1.00	1.450e+04	!Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002)	1186-1195 (cyc sat ? 6 + 3Hp)			
!mhx2j=mxh5j	2.500e+07	1.00	1.450e+04	!Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002)	1186-1195 (cyc sat ? 6 + 3Hp)			
!mhx2j=mxh5j	9.900e+07	1.00	1.730e+04	!Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002)	1186-1195 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx2j=mxhmj	1.500e+08	1.00	2.280e+04	!Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002)	1186-1195 (cyc sat ? 5 + 3Hp)+3kcal			
!mhxmj=mxh4j	2.900e+06	1.00	1.740e+04	!Glaude
et al., Energy Fuels, 16 (2002)	1186-1195 (cyc sat ? 7 + 2Hs)			
!mhx6oo=mxh6oo5j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx6oo=mxh6oo4j	5.700e+08	1.00	2.500e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)			
!mhx6oo=mxh6oo3j	1.000e+08	1.00	2.200e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)			
!mhx6oo=mxh6oo2j	1.700e+07	1.00	1.600e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 8 + 2Ht)-2kcal			
!mhx5oo=mxh5oo6j	4.950e+09	1.00	3.550e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 3Hp)			
!mhx5oo=mxh5oo4j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx5oo=mxh5oo3j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx5oo=mxh5oo2j	1.000e+08	1.00	2.200e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)			
!mhx5oo=mxh5oo1j	8.550e+08	1.00	2.800e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 3Hp)			
!mhx4oo=mxh4oo5j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx4oo=mxh4oo4j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx4oo=mxh4oo3j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx4oo=mxh4oo2j	5.700e+08	1.00	2.500e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)			
!mhx4oo=mxh4oo1j	5.700e+08	1.00	2.500e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 2Ht)-2kcal			
!mhx3oo=mxh3oo6j	1.500e+08	1.00	2.500e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)			
!mhx3oo=mxh3oo5j	5.700e+08	1.00	2.500e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)			
!mhx3oo=mxh3oo4j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx3oo=mxh3oo3j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx3oo=mxh3oo2j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx3oo=mxh3oo1j	3.300e+09	1.00	2.750e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Ht)-2kcal			
!mhx3oo=mxh3oo2j	2.837e+12	0.00	2.779e+04	!12
paper rs values				
!mhx2oo=mxh2oo6j	2.500e+07	1.00	2.400e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 8 + 3Hp)			
!mhx2oo=mxh2oo5j	1.000e+08	1.00	2.200e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 7 + 2Hs)			
!mhx2oo=mxh2oo4j	5.700e+08	1.00	2.500e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 6 + 2Hs)			
!mhx2oo=mxh2oo3j	3.300e+09	1.00	3.250e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 5 + 2Hs)			
!mhx2oo=mxh2oo2j	1.088e+12	0.00	2.921e+04	!12
paper rs values				
!mhx1oo=mxh1oo6j	1.500e+08	1.00	2.850e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+3.Spster			
ECM				
!mhxmoo=mxhmoo2j	1.000e+08	1.00	2.170e+04	!Buda et
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+2.Spster			
ECM				
!mhx6oo5oo=>mxh5oo6oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as

in ro2 isome				
!mhx5oo6oo=>mxh6oo5oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as
in ro2 isome				
!mhx5oo4oo=>mxh4oo5oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as
in ro2 isome				
!mhx4oo5oo=>mxh5oo4oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as
in ro2 isome				
!mhx4oo3oo=>mxh3oo4oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as
in ro2 isome				
!mhx3oo4oo=>mxh4oo3oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as
in ro2 isome				
!mhx3oo2oo=>mxh2oo3oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as
in ro2 isome				
!mhx2oo3oo=>mxh3oo2oo	7.275e+09	0.00	1.270e+04	!23 as
in ro2 isome				
!!!!!!				
!mhx6j=c2h4+mb4j	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285			
!mhx5j=c3h6+mp3j	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285			
!mhx4j=c4h8+me2j	2.000e+13	0.00	2.470e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285 (-4kcal)			
!mhx3j=c3h6+mp3d	2.000e+13	0.00	3.100e+04	!Boudard
al., Combust Flame, 142 (2005)	170-186			
!mhx3j=c5h10+ch3co2	2.000e+13	0.00	3.050e+04	!Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005)	451-463 (-4kcal)			
!mhx3j=c2h5+mb3d	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285			
!mhx2j=nc3h7+mp2d	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285			
!mhx2j=nc3h7+mp2d	5.000e+11	0.00	-1.000e+03	!3 anc7
o:h+c3h6=c				
!mhxmj=c2o+c5h11co	1.640e+22	-2.33	3.195e+04	!Dooley
et al., Combust. Flame, 153 (2008)	2-32			
co2+Ac5h11=hxaoj	1.000e+11	0.00	3.936e+04	!3 since
reaction				
!mhx6j=mxh5d	3.000e+13	0.00	3.800e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285 (2Hs)			
!mhx5j=mxh4d	3.000e+13	0.00	3.900e+04	!Touchard
et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005)	451-463 (3Hp)			
!mhx5j=mxh4d	3.000e+13	0.00	3.800e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285 (2Hs)			
!mhx4j=mxh3d	3.000e+13	0.00	3.800e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285 (2Hs)			
!mhx3j=mxh2d	3.000e+13	0.00	3.800e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)	273-285 (2Hs)			
!mhx3j=mxh2d	3.200e+13	0.00	3.480e+04	!Touchard
(2005) Th7se INPL (2Hs ally)				
!mhx2j=mxh1d	3.000e+13	0.00	5.000e+04	!Dayma et
al., Int J Chem Kinet, 35 (2003)				

et al., 2001					
mhxmooh+ho2=>mhxmooh+o2	2.290e+11	0.00	-1.790e+03	!Atkinson	
et al., 2001					
mhx6oo+h2o2=>mhx6oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx6oo+h2o2=>mhx6oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx5oo+h2o2=>mhx5oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx5oo+h2o2=>mhx5oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx4oo+h2o2=>mhx4oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx4oo+h2o2=>mhx4oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx3oo+h2o2=>mhx3oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx3oo+h2o2=>mhx3oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx2oo+h2o2=>mhx2oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhx2oo+h2o2=>mhx2oo+h2o2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhxmooh+ho2=>mhxmooh+ho2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
mhxmooh+ho2=>mhxmooh+ho2	2.400e+12	0.00	1.000e+04	!	
anc7; rnc7; one					
!!!!!!					
mhx6oo+mhx6j=>mhx6o+mhx6o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx6oo+mhx5j=>mhx6o+mhx5o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx6oo+mhx4j=>mhx6o+mhx4o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx6oo+mhx3j=>mhx6o+mhx3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx6oo+mhx2j=>mhx6o+mhx2o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx6oo+mhx1j=>mhx6o+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx5oo+mhx5j=>mhx5o+mhx5o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx5oo+mhx4j=>mhx5o+mhx4o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx5oo+mhx3j=>mhx5o+mhx3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx5oo+mhx2j=>mhx5o+mhx2o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx5oo+mhx1j=>mhx5o+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx4oo+mhx4j=>mhx4o+mhx4o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx4oo+mhx3j=>mhx4o+mhx3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx4oo+mhx2j=>mhx4o+mhx2o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx4oo+mhx1j=>mhx4o+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx3oo+mhx3j=>mhx3o+mhx3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx3oo+mhx2j=>mhx3o+mhx2o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx3oo+mhx1j=>mhx3o+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx2oo+mhx2j=>mhx2o+mhx2o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx2oo+mhx1j=>mhx2o+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx1oo+mhx1j=>mhx1o+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ho2+mhx6j=>oh+mhx6o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ho2+mhx5j=>oh+mhx5o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ho2+mhx4j=>oh+mhx4o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ho2+mhx3j=>oh+mhx3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ho2+mhx2j=>oh+mhx2o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ho2+mhx1j=>oh+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx6oo+ch3=>mhx6o+ch3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx5oo+ch3=>mhx5o+ch3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx4oo+ch3=>mhx4o+ch3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx3oo+ch3=>mhx3o+ch3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx2oo+ch3=>mhx2o+ch3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
mhx1oo+ch3=>mhx1o+ch3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ch3o2+mhx6j=>ch3o+mhx6o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ch3o2+mhx5j=>ch3o+mhx5o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ch3o2+mhx4j=>ch3o+mhx4o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	

ch3o2+mhx3j=>ch3o+mhx3o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ch3o2+mhx2j=>ch3o+mhx2o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
ch3o2+mhx1j=>ch3o+mhx1o	7.000e+12	0.00	-1.000e+03	!!! anc7	
!!!!!!					
mhx6oo+h2o=>mhx6o+h2o	1.500e+16	0.00	4.250e+04	!!7	
anc7, primary s					
mhx5oo+h2o=>mhx5o+h2o	9.450e+15	0.00	4.160e+04	!!7	
anc7, secondary					
mhx4oo+h2o=>mhx4o+h2o	9.450e+15	0.00	4.160e+04	!!7	
anc7, secondary					
mhx3oo+h2o=>mhx3o+h2o	9.450e+15	0.00	4.160e+04	!!7	
anc7, secondary					
mhx2oo+h2o=>mhx2o+h2o	5.950e+15	0.00	4.254e+04	!!7 anc,	
tertiary s					
mhxmooh+h2o=>mhxmooh+h2o	1.500e+16	0.00	4.250e+04	!!7	
anc7, primary s					
ch2o+mpe5j=>mhx6o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
ch3hco+mb4j=>mhx5o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
ch3+mp5o=>mhx5o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
ethco+mp3j=>mhx4o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8 anc7, alk	
to te					
c2h5+mb4o=>mhx4o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
nc3h7hco+me2j=>mhx3o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
nc3h7mp3o=>mhx3o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
nc4h9hco+ch3o2=>mhx2o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
pc4h9+me2o=>mhx2o	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
ch2o+hxaaj=>mhxmo	1.500e+11	0.00	1.190e+04	!!8	
anc7, alk to te					
mhx6o+h2o=>mhx6o	6.628e+09	1.11	4.226e+03	!!8	
anc7, alk to te					
anist: calculat					
mhxmooh+h2o=>mhxmooh+h2o	6.628e+09	1.11	4.226e+03	!!8	
anc7, alk to te					
anist: calculat					
!!!!!!					
mhx5d+ho2=>mhx6oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx5d+ho2=>mhx5oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx4d+ho2=>mhx5oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx4d+ho2=>mhx4oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx3d+ho2=>mhx4oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx2d+ho2=>mhx3oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx2d+ho2=>mhx2oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx1d+ho2=>mhx1oo+h2o	1.500e+11	0.00	7.800e+03	!Curran	
et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177					
mhx6oo+h2o=>mhx6o+h2o	2.000e+13	0.00	3.100e+04	!	
mhx5oo+h2o=>mhx5o+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx4oo+h2o=>mhx4o+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx3oo+h2o=>mhx3o+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx2oo+h2o=>mhx2o+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx1oo+h2o=>mhx1o+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	

mhx3oo+h2o=>mb3d+c2h4+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx3oo+h2o=>mp3j*o+c3h6+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx2oo+h2o=>mb2oo+h2o+c2h4	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx2oo+h2o=>mp2d+c3h6+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
mhx2oo+h2o=>me2o+c4h8+h2o	2.000e+13	0.00	2.870e+04	!	
!!!!!!					
mhx6oo+h2o=>mhx6o+h2o	9.100e+10	0.00	1.660e+04	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)					
mhx6oo+h2o=>mhx6o+h2o	3.600e+09	0.00	7.000e+03	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)					
mhx6oo+h2o=>mhx6o+h2o	1.700e+08	0.00	1.950e+03	!Battin-	
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)					
mhx5oo+h2o=>mhx5o+h2o	9.100e+10	0.00	1.660e+04	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)					
mhx5oo+h2o=>mhx5o+h2o	3.600e+09	0.00	7.000e+03	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)					
mhx5oo+h2o=>mhx5o+h2o	1.700e+08	0.00	1.950e+03	!Battin-	
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)					
mhx4oo+h2o=>mhx4o+h2o	9.100e+10	0.00	1.660e+04	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)					
mhx4oo+h2o=>mhx4o+h2o	3.600e+09	0.00	7.000e+03	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)					
mhx4oo+h2o=>mhx4o+h2o	1.700e+08	0.00	1.950e+03	!Battin-	
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)					
mhx3oo+h2o=>mhx3o+h2o	9.100e+10	0.00	1.660e+04	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)					
mhx3oo+h2o=>mhx3o+h2o	3.600e+09	0.00	7.000e+03	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)					
mhx3oo+h2o=>mhx3o+h2o	1.700e+08	0.00	1.950e+03	!Battin-	
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)					
mhx2oo+h2o=>mhx2o+h2o	9.100e+10	0.00	1.660e+04	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)					
mhx2oo+h2o=>mhx2o+h2o	3.600e+09	0.00	7.000e+03	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)					
mhx2oo+h2o=>mhx2o+h2o	1.700e+08	0.00	1.950e+03	!Battin-	
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)					
mhx1oo+h2o=>mhx1o+h2o	9.100e+10	0.00	1.660e+04	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)					
mhx1oo+h2o=>mhx1o+h2o	3.600e+09	0.00	7.000e+03	!Buda et	
al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)					
mhx1oo+h2o=>mhx1o+h2o	1.700e+08	0.00	1.950e+03	!Battin-	
Leclerc, Prog Energy Combust Sci, 34 (2008) 440-498 (cycle 6)					
!!!!!!					
mhx6oo+h2o=>mb4j*o+c2h4+h2o	2.400e+08	1.50	2.005e+03	!25	
dbr, see sheet					
mhx6oo+h2o=>mp4d+hco+h2o	4.800e+08	1.50	2.785e+03	!25	
dbr, see sheet					
mhx6oo+h2o=>mb4j3*o+c2h4+h2o	2.400e+08	1.50	2.005e+03	!25	
dbr, see sheet					
mhx6oo+h2o=>mb3d+ch2hco+h2o	4.800e+08	1.50	2.785e+03	!25	
dbr, see sheet					
mhx6oo+h2o=>mp2d+ch2hco+h2o	9.600e+08	1.50	2.785e+03	!25	
dbr, see sheet*4					
mhx6oo+h2o=>mp3j*o+c3h6+h2o	2.400e+08	1.50	2.005e+03	!25	
dbr, see sheet					
mhx6oo+h2o=>mb3d+ch3co+h2o	2.400e+08	1.50	2.005e+03	!25	
dbr, see sheet					
mhx6oo+h2o=>mp2d+ch2coch3+h2o	9.600e+08	1.50	2.005e+03	!25	
dbr, see sheet*4					
mhx6oo+h2o=>mp2d+c2h5co+h2o	9.600e+08	1.50	2.005e+03	!25	
dbr, see sheet*4					
mhx6oo+h2o=>c5h10co+ocho+h2o	1.920e+09	1.50	2.785e+03	!25	
dbr, see sheet*4					
mhx6oo+h2o=>mb4j*o+c2h4+h2o	1.200e+06	2.00	-1.192e+03	!25	
dbr, see sheet					
mhx6oo+h2o=>mp4d+hco+h2o	2.400e+06	2.00	-1.192e+03	!25	
dbr, see sheet					
m					

my evans-poly  
mhcyc5o2+ch3o2=>mp2d+ch2coch3+ch3o2h 8.000e+12 0.00 1.770e+04  
!25 my evans-polyan\*4  
mhcyc4o2+ch3o2=>mp2d+c2h5co+ch3o2h 8.000e+12 0.00 1.770e+04 !25  
my evans-polyan\*4  
mhcyc2om+ch3o2=>c5h10co+ocho+ch3o2h 1.600e+13 0.00 1.770e+04 !25  
my evans-polyan\*4  
!!!!!!  
mhx6ooh5oo=>mhx5ooh6\*o+oh 3.300e+09 1.00 3.550e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)  
mhx6ooh4oo=>mhx4ooh6\*o+oh 5.700e+08 1.00 2.800e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)  
mhx6ooh3oo=>mhx3ooh6\*o+oh 2.000e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx6ooh2oo=>mhx2ooh6\*o+oh 1.700e+07 1.00 2.400e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 2Hp)  
mhx5ooh6oo=>mhx5ooh6\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx5ooh4oo=>mhx4ooh5\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx5ooh3oo=>mhx3ooh5\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx5ooh2oo=>mhx2ooh5\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.200e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)  
mhx4ooh6oo=>mhx6ooh4\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhx4ooh5oo=>mhx5ooh4\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx4ooh3oo=>mhx3ooh4\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx4ooh2oo=>mhx2ooh4\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhx3ooh6oo=>mhx6ooh3\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.200e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Hs)  
mhx3ooh5oo=>mhx5ooh3\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
mhx3ooh4oo=>mhx4ooh3\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx3ooh2oo=>mhx2ooh3\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
mhx2ooh6oo=>mhx6ooh2\*o+oh 8.500e+06 1.00 1.600e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 8 + 1Ht)-  
2kcal  
mhx2ooh5oo=>mhx5ooh2\*o+oh 5.000e+07 1.00 1.700e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)-  
2kcal  
mhx2ooh4oo=>mhx4ooh2\*o+oh 2.850e+07 1.00 2.000e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Ht)-  
2kcal  
mhx2ooh3oo=>mhx3ooh2\*o+oh 1.650e+09 1.00 2.750e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Ht)-  
2kcal  
mhx2ooh2oo=>mhx2ooh2\*o+oh 5.000e+07 1.00 2.170e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 2Ht)+  
2.7poster ECM  
mhmoooh2oo=>mhx2oohm\*o+oh 1.000e+08 1.00 2.850e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cyc sat ? 7 + 3Hp)+  
3.5poster ECM  
!!!!!!  
mhx5ooh6\*o=>mpe5\*o+hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx4ooh6\*o=>mb4\*o+ch2hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx3ooh6\*o=>me2j+c4hd3oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
!!!!!!

Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx2ooh6\*o=>ch3co2+choc3h6cho+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx6ooh5\*o=>mpe5j\*o+ch2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx4ooh5\*o=>mb4\*o+ch3co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx3ooh5\*o=>mp3\*o+ch2coch3\*oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx2ooh5\*o=>ch3co2+c5ald4oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx6ooh4\*o=>mpe5j\*o+ch2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx5ooh4\*o=>mb4j\*o+ch3hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx4ooh4\*o=>mp3j\*o+ch2co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx3ooh4\*o=>mp3\*o+c2h5co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx2ooh4\*o=>ch3co2+c5ald2oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx6ooh3\*o=>mpe5j3\*o+ch2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx5ooh3\*o=>mb4j3\*o+ch3hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx4ooh3\*o=>mp3j3\*o+ch2co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx3ooh3\*o=>mp3\*o+c2h5co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx2ooh3\*o=>ch3co2+c5ald2oxo+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx6ooh2\*o=>mpe5j2\*o+ch2o+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx5ooh2\*o=>mb4j2\*o+ch3hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx4ooh2\*o=>mp3j2\*o+ch2co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx3ooh2\*o=>mp3\*o+c2h5co+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
mhx2ooh2\*o=>chococ+nc4h9hco+oh 1.00e+16 0.00 4.30e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177  
!!!!!!  
mhx5d+o=>mhx5d4j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+o=>mhx5d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+o=>mhx5d4j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+h=>mhx5d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+oh=>mhx5d4j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+oh=>mhx5d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+h2=>mhx5d4j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+h2=>mhx5d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx5d+ch3o=>mhx5d4j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mhx5d+ch3o=>mhx5d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)

!mhx5d+oh=>ch2o+mpe5j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
!mhx5d+oh=>ch3+mpe5\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
mhx5d = me2j + c4h7 2.500e+16 0.0  
68000.0 !  
mhx5d = mp3j + ac3h5 1.000e+16 0.0  
71000.0 !  
c2h3 + mb4j = mhx5d 1.000e+13 0.0  
0.0 ! (30/06/2000)  
mhx5d + o2 = mhx5d4j + ho2 4.000e+12 0.0  
37000.0 !  
mhx5d + o2 = mhx5d2j + ho2 4.000e+13 0.0  
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2  
mhx5d + o mpe5j + hco 1.000e+11 0.0 -  
1050.0 !Mohammed (curran2000)  
mhx5d4j + h = mhx5d 1.000e+13 0.0  
0.0 ! (RTI)  
mhx5d2j + h = mhx5d 1.000e+13 0.0  
0.0 ! (RTI)  
mhx5d4j=c4h6+me2j 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-  
diene)  
mhx5d2j=ac3h5+mp2d 1.300e+13 0.00 3.590e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-  
diene)  
c5h8co+ch3o=mhx5d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3  
anc7 :oh+c3h6=c  
!!!!!!  
mhx4d+o=>mhx5d4j+oh 1.740e+11 0.70 5.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)  
mhx4d+o=>mhx4d3j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+o=>mhx4d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+h=>mhx5d4j+h2 1.740e+11 0.70 5.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)  
mhx4d+h=>mhx4d3j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+h=>mhx4d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+oh=>mhx5d4j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.980e+02 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)  
mhx4d+oh=>mhx4d3j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+oh=>mhx4d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+h2=>mhx5d4j+h2o2 9.600e+03 2.60 1.390e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (3Hp ally)  
mhx4d+h2=>mhx4d3j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+h2=>mhx4d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mhx4d+ch3o=>mhx5d4j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mhx4d+ch3o=>mhx4d3j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mhx4d+ch3o=>mhx4d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mhx4d+oh=>ch3hco+mb4j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
!mhx4d+oh=>c2h5+mb4\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
mhx4d + o2 = mhx5d4j + ho2 4.000e+12 0.0

37000.0 !  
mhx4d + o2 = mhx4d3j + ho2 4.000e+12 0.0  
37000.0 !  
mhx4d + o2 = mhx4d2j + ho2 4.000e+13 0.0  
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2  
mhx4d + o = mb4j + ch3co 1.000e+11 0.0 -  
1050.0 !Mohammed (curran2000)  
mhx4d3j + h = mhx4d 1.000e+13 0.0  
0.0 ! (RTI)  
mhx4d3j=c5h8+ch3co2 1.300e+13 0.00 3.390e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rt+1,3-  
diene) ! A reprendre  
mhx4d2j=mp2d+ac3h5 1.300e+13 0.00 5.000e+04 !  
c5h8co+ch3o=mhx4d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3  
anc7 :oh+c3h6=c  
!!!!!!  
mhx3d+o=>mhx4d3j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+o=>mhx3d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+h=>mhx4d3j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+h=>mhx3d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+oh=>mhx4d3j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+oh=>mhx3d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+h2=>mhx4d3j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+h2=>mhx3d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx3d+ch3o=>mhx4d3j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mhx3d+ch3o=>mhx3d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
!!!!!!  
mhx3d+oh=>ch2o+mp3j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
!mhx3d+oh=>nc3h7+mp3\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
mhx3d + o2 = mhx4d3j + ho2 4.000e+12 0.0  
37000.0 !  
mhx3d + o2 = mhx3d2j + ho2 4.000e+13 0.0  
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2  
mhx3d + o = mp3j + c2h5co 1.000e+11 0.0 -  
1050.0 !Mohammed (curran2000)  
mhx3d2j + h = mhx3d 1.000e+13 0.0  
0.0 ! (RTI)  
c5h8co+ch3o=mhx3d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 !3  
anc7 :oh+c3h6=c  
!!!!!!  
mhx2d+o=>mhx3d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx2d+h=>mhx3d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx2d+oh=>mhx3d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx2d+h2=>mhx3d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mhx2d+ch3o=>mhx3d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mhx2d + o2 = mhx3d2j + ho2 4.000e+12 0.0  
37000.0 !  
mhx2d + o = me2j + c3h7co 1.000e+11 0.0 -

1050.0 !Mohammed (curran2000)  
 !mhx2d+oh+nc3h7hco+me2j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
 Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
 !mhx2d+oh+pc4h9+me2\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
 Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
 !!!!!  
 !mhx5d+oh=mhx5oh6j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx4d+oh=mhx4oh5j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx3d+oh=mhx3oh4j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx2d+oh=mhx2oh3j 2.760e+12 0.00 -1.042e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx5oh6j+o2=mhx5oh6oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx4oh5j+o2=mhx4oh5oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx3oh4j+o2=mhx3oh4oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx2oh3j+o2=mhx2oh3oo 1.000e+12 0.00 -1.100e+03 !7  
 !pitz propene oh  
 !mhx5oh6oo>=mpe5\*o+oh+ch2o 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7  
 !irreversible; p  
 !mhx4oh5oo>=mb4\*o+oh+ch3hco 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7  
 !irreversible; p  
 !mhx3oh4oo>=mp3\*o+oh+ethco 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7  
 !irreversible; p  
 !mhx2oh3oo>=me2\*o+oh+nc3h7hco 1.000e+12 0.00 2.868e+04 !7  
 !irreversible; p  
 !!!!!  
 !hco+mpe5j=mhx6\*o 1.000e+13 0.00 0.000e+00 !9  
 !ALLARA and shaw  
 !mhx6\*o+o2=mhx6j\*o+ho2 2.000e+13 0.50 4.220E+04 !as  
 !rc3h7hco  
 !mhx6\*o+h=mhx6j\*o+h2 4.000e+13 0.00 4.200e+03 !26  
 !anc7: aldehydic  
 !mhx6\*o+oh=mhx6j\*o+h2o 2.690e+10 0.76 -3.400e+02 !26  
 !anc7: aldehydic  
 !mhx6\*o+o=mhx6j\*o+oh 5.000e+12 0.00 1.790e+03 !26  
 !anc7: aldehydic  
 !mhx6\*o+h2o2=mhx6j\*o+h2o2 2.800e+12 0.00 1.360e+04 !26  
 !anc7: aldehydic  
 !mhx6j\*o>=mpe5j+co 1.834e+15 -0.73 1.291e+04 !7  
 !Claude et al., DMC c2h5co  
 !mhx6j5\*o>=ch2co+mb4j 1.000e+13 0.00 2.800e+04 !7  
 !Sato et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311  
 !hco+mpe5j4\*o=mhx6\*o4\*o 1.000e+13 0.00 0.000e+00  
 !!!!!  
 !Methylpentanoate!  
 !!!!!  
 !!!!!  
 !mpe+mpe5j+h 7.900e+15 0.0 9.797e+04 !as n-  
 !C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608  
 !mpe+mpe4j+h 5.000e+15 0.0 9.499e+04 !as s-  
 !C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608  
 !mpe+mpe3j+h 5.000e+15 0.0 9.499e+04 !as s-  
 !C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608  
 !mpe2j+h+m 1.000e+14 0.0 0.0 !1 rnc7  
 !\* h +fragm  
 !mpe+mpemj+h 7.900e+15 0.0 9.397e+04 !as n-  
 !C4H9 Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608 (-4kcal prox O)  
 !mpe+mb4j+ch3 5.000e+16 0.0 8.466e+04 !asC4H10  
 !Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608  
 !mpe+mp3j+c2h5 7.940e+16 0.0 8.028e+04 !asC4H10

Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608  
 !mpe+me2j+nc3h7 7.940e+16 0.0 8.028e+04 !asC4H10  
 !Dean et al., J.Phys.Chem. 89 (1985) 4600-4608  
 !mpe+ch3co2+pc4h9 1.130e+16 0.0 7.770e+04 !as Sato  
 !et al., Combust. Flame 122 (2000) 291-311 (-4kcal prox O)  
 !nc4h9co+ch3o+mppe 1.500e+13 0.0 0.0 !asDMC  
 !Claude et al., Proc.Combust.Inst. 31 (2005) 1111-1118  
 !mpe+pea3j+ch3 3.160e+16 0.0 8.307e+04 !asDME  
 !Batt et al., Proc. Combust. Inst. 19 (1982) 81-87  
 !!!!!  
 !mpe+o2+mpe5j+ho2 2.000e+13 0.0 5.087e+04 !Tsang et  
 !al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
 !mpe+o2+mpe4j+ho2 4.000e+13 0.0 4.769e+04 !Tsang et  
 !al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
 !mpe+o2+mpe3j+ho2 4.000e+13 0.0 4.769e+04 !Tsang et  
 !al., J. Phys. Chem. Ref. Data 17 (1988) 887-  
 !mpe+o2+mpe2j+ho2 4.000e+13 0.0 3.730e+04 !  
 !Estimated  
 !mpe+o2+mpemj+ho2 2.050e+13 0.0 4.491e+04 !Dayma et  
 !al., Proc. Combust. Inst.  
 !!!!!  
 !mpe+h=mpe5j+h2 9.400e+04 2.75 6.280e+03 !2 anc7,  
 !primary f  
 !mpe+h=mpe4j+h2 1.300e+06 2.4 4.471e+03 !2 anc7,  
 !secondary  
 !mpe+h=mpe3j+h2 1.300e+06 2.4 4.471e+03 !2 anc7,  
 !secondary  
 !mpe+h=mpe2j+h2 5.400e+04 2.5 -1.900e+03 !  
 !mpe+h=mpemj+h2 1.440e+13 0.0 6.095e+03 ! (HELD  
 !94)  
 !mpe+o=mpe5j+oh 9.650e+04 2.68 3.716e+03 !2 anc7,  
 !primary f  
 !mpe+o=mpe4j+oh 4.770e+04 2.71 2.106e+03 !2 anc7,  
 !secondary  
 !mpe+o=mpe3j+oh 4.770e+04 2.71 2.106e+03 !2 anc7,  
 !secondary  
 !mpe+o=mpe2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
 !mpe+o=mpemj+oh 9.650e+04 2.68 3.716e+03 !2 anc7,  
 !primary f  
 !mpe+oh=mpe5j+h2o 5.250e+09 0.97 1.590e+03 !2 rnc7,  
 !primary;  
 !mpe+oh=mpe4j+h2o 4.680e+07 1.61 -3.500e+01 !2 rnc7,  
 !secondary  
 !mpe+oh=mpe3j+h2o 4.680e+07 1.61 -3.500e+01 !2 rnc7,  
 !secondary  
 !mpe+oh=mpe2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
 !mpe+oh=mpemj+h2o 7.100e+06 1.80 -5.960e+02 ! (HELD  
 !98)  
 !mpe+ho2=mpe5j+h2o2 8.400e+12 0.00 2.044e+04 !2 anc7,  
 !primary f  
 !mpe+ho2=mpe4j+h2o2 5.600e+12 0.00 1.769e+04 !2 anc7,  
 !secondary  
 !mpe+ho2=mpe3j+h2o2 5.600e+12 0.00 1.769e+04 !2 anc7,  
 !secondary  
 !mpe+ho2=mpe2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
 !mpe+ho2=mpemj+h2o2 87) 9.640e+10 0.00 1.258e+04 ! (TSANG  
 !87)  
 !mpe+hco=mpe5j+ch2o 1.020e+05 2.50 1.850e+04 !ST  
 !mpe+hco=mpe4j+ch2o 1.080e+07 1.90 1.700e+04 !ST  
 !mpe+hco=mpe3j+ch2o 1.080e+07 1.90 1.700e+04 !ST  
 !mpe+hco=mpe2j+ch2o 1.140e+09 1.30 1.550e+04 !ST  
 !mpe+hco=mpemj+ch2o 1.020e+05 2.50 1.850e+04 !ST  
 !mpe+ch3=mpe5j+ch4 4.520e+01 3.65 7.154e+03 !2 anc7,  
 !primary f

mpe+ch3=mpe4j+ch4 2.705e+04 2.26 7.287e+03 !2 anc7,  
 secondary  
 mpe+ch3=mpe3j+ch4 2.705e+04 2.26 7.287e+03 !2 anc7,  
 secondary  
 mpe+ch3=mpe2j+ch4 1.000e+11 0.00 7.300e+03 !  
 mpe+ch3=mpemj+ch4 4.520e+01 3.65 7.154e+03 !2 anc7,  
 primary f  
 mpe+ch3o=mpe5j+ch3oh 1.581e+11 0.00 7.000e+03 !2 rnc7,  
 primary;  
 mpe+ch3o=mpe4j+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 !2 anc7,  
 secondary  
 mpe+ch3o=mpe3j+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 !2 anc7,  
 secondary  
 mpe+ch3o=mpe2j+ch3oh 1.780e+12 0.00 1.200e+03 !  
 mpe+ch3o=mpemj+ch3oh 1.581e+11 0.00 7.000e+03 !2 rnc7,  
 primary;  
 mpe+ch2oh=mpe5j+ch3oh 1.581e+11 0.00 7.000e+03 !2 rnc7,  
 primary;  
 mpe+ch2oh=mpe4j+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 !2 anc7,  
 secondary  
 mpe+ch2oh=mpe3j+ch3oh 1.095e+11 0.00 5.000e+03 !2 anc7,  
 secondary  
 mpe+ch2oh=mpe2j+ch3oh 3.600e+01 2.95 1.000e+04 !  
 mpe+ch2oh=mpemj+ch3oh 1.581e+11 0.00 7.000e+03 !2 rnc7,  
 primary;  
 mpe+ch3o2=mpe5j+ch3o2h 8.400e+12 0.00 2.044e+04 !2  
 corrected to ag  
 mpe+ch3o2=mpe4j+ch3o2h 5.600e+12 0.00 1.769e+04 !2  
 corrected to ag  
 mpe+ch3o2=mpe3j+ch3o2h 5.600e+12 0.00 1.769e+04 !2  
 corrected to ag  
 mpe+ch3o2=mpe2j+ch3o2h 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !2 same  
 as ho2  
 mpe+ch3o2=mpemj+ch3o2h 8.400e+12 0.00 2.044e+04 !2  
 corrected to ag  
 mpe+c2h3=mpe5j+c2h4 5.010e+11 0.00 1.800e+04 !2 rnc7,  
 primary;  
 mpe+c2h3=mpe4j+c2h4 4.000e+11 0.00 1.680e+04 !2 rnc7,  
 secondary  
 mpe+c2h3=mpe3j+c2h4 4.000e+11 0.00 1.680e+04 !2 rnc7,  
 secondary  
 mpe+c2h3=mpe2j+c2h4 4.000e+11 0.00 1.430e+04 !2 rnc7  
 \*, tertiary  
 mpe+c2h3=mpemj+c2h4 5.010e+11 0.00 1.800e+04 !2 rnc7  
 \*\*, primary  
 mpe+c2h5=mpe5j+c2h6 5.010e+10 0.00 1.340e+04 !2 rnc7,  
 primary;  
 mpe+c2h5=mpe4j+c2h6 5.000e+10 0.00 1.040e+04 !2 rnc7,  
 secondary  
 mpe+c2h5=mpe3j+c2h6 5.000e+10 0.00 1.040e+04 !2 rnc7,  
 secondary  
 mpe+c2h5=mpe2j+c2h6 2.200e+00 3.50 4.140e+03 !  
 mpe+c2h5=mpemj+c2h6 5.010e+10 0.00 1.340e+04 !2 rnc7  
 \*\*, primary  
 mpe+ac3h5=mpe5j+c3h6 1.200e+02 3.30 1.984e+04 !ST  
 mpe+ac3h5=mpe4j+c3h6 8.000e+01 3.30 1.817e+04 !ST  
 mpe+ac3h5=mpe3j+c3h6 8.000e+01 3.30 1.817e+04 !ST  
 mpe+ac3h5=mpe2j+c3h6 8.000e+01 3.30 1.717e+04 !ST  
 mpe+ac3h5=mpemj+c3h6 1.200e+02 3.30 1.984e+04 !ST  
 mpe+mpemj+mpe5j+mpe 1.200e+02 3.30 1.984e+04 !ST  
 mpe+mpemj+mpe4j+mpe 8.000e+01 3.30 1.817e+04 !ST  
 mpe+mpemj+mpe3j+mpe 8.000e+01 3.30 1.817e+04 !ST  
 mpe+mpemj+mpe2j+mpe 1.200e+02 3.30 1.984e+04 !ST  
 !mpe+mpe5oo=mpe5j+mpe5oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new

reaction pe  
 !mpe+mpe5oo=mpe4j+mpe5oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe5oo=mpe3j+mpe5oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe5oo=mpe2j+mpe5oo 1.000e+12 0.00 1.455e+04 !  
 !mpe+mpe5oo=mpemj+mpe5oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe4oo=mpe5j+mpe4oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe4oo=mpe4j+mpe4oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe4oo=mpe3j+mpe4oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe4oo=mpe2j+mpe4oo 1.000e+12 0.00 1.455e+04 !  
 !mpe+mpe4oo=mpemj+mpe4oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe3oo=mpe5j+mpe3oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe3oo=mpe4j+mpe3oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe3oo=mpe3j+mpe3oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe3oo=mpe2j+mpe3oo 1.000e+12 0.00 1.455e+04 !  
 !mpe+mpe3oo=mpemj+mpe3oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe2oo=mpe5j+mpe2oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe2oo=mpe4j+mpe2oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe2oo=mpe3j+mpe2oo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpe2oo=mpe2j+mpe2oo 1.000e+12 0.00 1.455e+04 !  
 !mpe+mpe2oo=mpemj+mpe2oo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpemoo=mpe5j+mpemoo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpemoo=mpe4j+mpemoo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpemoo=mpe3j+mpemoo 1.867e+12 0.00 1.769e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !mpe+mpemoo=mpe2j+mpemoo 1.000e+12 0.00 1.455e+04 !  
 !mpe+mpemoo=mpemj+mpemoo 2.800e+12 0.00 2.044e+04 !2 new  
 reaction pe  
 !!!!!  
 !mpe5j+o2=mpe5oo 9.000e+18 -2.50 0.000e+00 !Buda et  
 !al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks)  
 !mpe4j+o2=mpe4oo 1.700e+19 -2.50 0.000e+00 !Buda et  
 !al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (kp+ks)  
 !mpe3j+o2=mpe3oo 1.050e+19 -2.50 0.000e+00 !Buda et  
 !al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (ks+kt)  
 !mpe2j+o2=mpe2oo 1.200e+10 0.00 -2.300e+03 !  
 !mpemj+o2=mpemoo 4.500e+12 0.00 0.000e+00 !10 nc7;  
 !primary  
 !mpe5oo+h2o2=mpe5oo+h2o 1.800e+19 -2.50 0.000e+00 !  
 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186  
 !2ks)  
 !mpe5oo+h2o2=mpe5oo+h2o 1.050e+19 -2.50 0.000e+00 !  
 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186  
 !2ks+kt)  
 !mpe4oo+h2o2=mpe4oo+h2o 1.500e+18 -2.50 0.000e+03 !  
 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186  
 !2kt)  
 !mpe4oo+h2o2=mpe4oo+h2o 3.000e+18 -2.50 0.000e+00 !  
 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186  
 !2kt)  
 !mpe4oo+h2o2=mpe4oo+h2o 1.200e+10 0.00 -2.300e+03 !





!mpe50oh3j=>mb3d+ch2o+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
!mpe50oh2j=>mp2d+c2h4+ho2 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
!mpe40oh2j=>mp2d+ch3hco+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
!mpe30oh5j=>mp3\*o+c2h4+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
!mpe20oh5j=>mp2d+c2h4+ho2 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
!mpe20oh4j=>me2\*o+c3h6+oh 2.000e+13 0.00 2.870e+04 !  
!!!!  
!mpe50oh3j=>mpecy5o3+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
!mpe50oh2j=>mpecy5o2+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
!mpe40oh2j=>mpecy4o2+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
!mpe20oh5j=>mpecy5o2+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
!mpe20oh4j=>mpecy4o2+oh 9.100e+10 0.00 1.660e+04 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 4)  
!mpe20ohm3j=>mpecy2om+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
!mpe20ohm2j=>mpecy2om+oh 3.600e+09 0.00 7.000e+03 !Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle 5)  
!!!!  
!mpecy5o3+h=>mp3j\*o+c2h4+h2 dbr, see sheet 2.400e+08 1.50 2.005e+03 125  
!mpecy5o3+h=>mb3d+hco+h2 dbr, see sheet 4.800e+08 1.50 2.785e+03  
!mpecy5o2+h=>mp3j2\*o+c2h4+h2 dbr, see sheet 4.800e+08 1.50 2.005e+03 125  
!mpecy5o2+h=>mp2d+ch2hco+h2 dbr, see sheet 4.800e+08 1.50 2.785e+03 125  
!mpecy4o2+h=>me2j\*o+c3h6+h2 dbr, see sheet 4.800e+08 1.50 2.005e+03 125  
!mpecy4o2+h=>mp2d+ch3co+h2 dbr, see sheet 2.400e+08 1.50 2.005e+03 125  
!mpecy2om+h=>c3h7coco+ch2o+h2 dbr, see sheet 4.800e+08 1.50 2.005e+03 125  
!mpecy2om+h=>c4h8cco+cho+h2 dbr, see sheet 4.800e+08 1.50 2.785e+03 125  
!mpecy5o3+oh=>mp3j\*o+c2h4+h2o dbr, see sheet 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy5o3+oh=>mb3d+hco+h2o dbr, see sheet 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy5o2+oh=>mp3j2\*o+c2h4+h2o 125 dbr, see sheet 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy5o2+oh=>mp2d+ch2hco+h2o dbr, see sheet 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy4o2+oh=>me2j\*o+c3h6+h2o dbr, see sheet 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy4o2+oh=>mp2d+ch3co+h2o dbr, see sheet 1.200e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy2om+oh=>c3h7coco+ch2o+h2o dbr, see sheet 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy2om+oh=>c4h8cco+cho+h2o dbr, see sheet 2.400e+06 2.00 -1.192e+03 125  
!mpecy5o3+h2=>mp3j\*o+c2h4+h2o2 my evans-polyan 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
!mpecy5o3+h2=>mb3d+hco+h2o2 my evans-polyan 4.000e+12 0.00 1.440e+04 125  
!mpecy5o2+h2=>mp3j2\*o+c2h4+h2o2 my evans-polyan 4.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
!mpecy5o2+h2=>mp2d+ch2hco+h2o2 my evans-polyan 4.000e+12 0.00 1.440e+04 125  
!mpecy4o2+h2=>me2j\*o+c3h6+h2o2 my evans-polyan 4.000e+12 0.00 1.326e+04 125

!mpecy4o2+h2=>mp2d+ch3co+h2o2 2.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
!mpecy2om+h2=>c3h7coco+ch2o+h2o2 4.000e+12 0.00 1.326e+04 125  
my evans-po  
!mpecy2om+h2=>c4h8cco+cho+h2o2 4.000e+12 0.00 1.440e+04 125  
my evans-po  
!!!!  
!mpe50oh40o=>mpe4ooh5\*o+oh 3.300e+09 1.00 3.550e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 2Hp)  
!mpe50oh30o=>mpe3ooh5\*o+oh 5.700e+08 1.00 2.800e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 2Hp)  
!mpe50oh20o=>mpe2ooh5\*o+oh 1.000e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)  
!mpe40oh50o=>mpe5ooh4\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
!mpe40oh30o=>mpe3ooh4\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
!mpe40oh20o=>mpe2ooh4\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
!mpe30oh50o=>mpe5ooh3\*o+oh 2.850e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Hs)  
!mpe30oh40o=>mpe4ooh3\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
!mpe30oh20o=>mpe2ooh3\*o+oh 1.650e+09 1.00 3.250e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Hs)  
!mpe20oh50o=>mpe5ooh2\*o+oh 5.000e+07 1.00 1.900e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)  
!mpe20oh40o=>mpe4ooh2\*o+oh 2.850e+07 1.00 2.200e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 6 + 1Ht)  
!mpe20oh30o=>mpe3ooh2\*o+oh 1.650e+09 1.00 2.950e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 5 + 1Ht)  
!mpe20oh20o=>mpe2ooh2\*o+oh 5.000e+07 1.00 1.900e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 1Ht)  
!mpe20oh10o=>mpe2ooh1\*o+oh 1.000e+08 1.00 2.500e+04 !  
Buda et al., Combust Flame, 142 (2005) 170-186 (cycle ? 7 + 2Hp)  
!!!!  
!mpe40oh5\*o=>mb4\*o+hco+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe30oh5\*o=>mp3\*o+ch2hco+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe30oh5\*o=>me2j+choch2cho+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04  
!Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe20oh5\*o=>ch3co2+choch2cho+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe50oh4\*o=>mb4j\*o+ch2o+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe30oh4\*o=>mp3\*o+ch3co+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe20oh4\*o=>ch3co2+c4h8cco+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe50oh3\*o=>mb4j3\*o+ch2o+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe40oh3\*o=>mp3j\*o+ch3co+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe20oh3\*o=>me2j\*o+c2h5co+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe20oh3\*o=>ch3co2+c4h8cco+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe50oh2\*o=>mb4j2\*o+ch2o+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe40oh2\*o=>mp3j2\*o+ch3co+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe30oh2\*o=>me2j\*o+ethco+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1998) 149-177 (+2.5kcal)

!mpe20ohm2\*o=>peaoj2\*o+ch2o+ch 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177 (+2.5kcal)  
!mpe20ohm\*o=>chooco+nc3h7hco+oh 1.500e+16 0.00 4.450e+04 !  
Curran et al., Combust Flame, 114 (1999) 149-177 (+2.5kcal)  
!!!!  
mpe4d + o = mpe4d3j + oh 8.800E+10 0.7  
3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + o = mpe4d2j + oh 8.800E+10 0.7  
3.250e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + h = mpe4d3j + h2 5.400E+04 2.5 -  
1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + h = mpe4d2j + h2 5.400E+04 2.5 -  
1.900e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + oh = mpe4d3j + h2o 3.000E+06 2.0 -  
1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + oh = mpe4d2j + h2o 3.000E+06 2.0 -  
1.520e+03 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + ho2 = mpe4d3j + h2o2 6.400E+03 2.6  
1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + ho2 = mpe4d2j + h2o2 6.400E+03 2.6  
1.240e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs all)  
mpe4d + oh = mb4j + ch2o 1.000E+11 0.0 -  
4000.0 !Mohammed (curran2000)  
mpe4d + oh = ch3 + mb4\*o 1.370e+12 0.00 -  
1.040e+03 !Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
!mpe4d+ch3o=>mpe4d3j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
!mpe4d+ch3o=>mpe4d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mpe4d = me2j + ac3h5 2.500E+16 0.0  
68000.0 !  
c2h3 + mp3j = mpe4d 1.000E+13 0.0  
0.0 ! (30/06/2000)  
mpe4d + o2 = mpe4d3j + ho2 4.000E+12 0.0  
37000.0 !  
mpe4d + o2 = mpe4d2j + ho2 4.000E+13 0.0  
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2  
!mpe4d + ch3 = mpe4d3j + ch4 2.000E+11 0.0  
6800.0 ! (WESTB.87)  
!mpe4d + ch3 = mpe4d2j + ch4 2.000E+11 0.0  
6800.0 ! (WESTB.87)  
mpe4d + o = mb4j + hco 1.000E+11 0.0 -  
1050.0 !Mohammed (curran2000)  
mpe4d3j + h = mpe4d 1.000E+13 0.0  
0.0 ! (RT1)  
mpe4d2j + h = mpe4d 1.000E+13 0.0  
0.0 ! (RT1)  
!mpe4d3j + ho2 => me2j + acro1 + oh 1.000E+12 0.0  
8000.0 ! (07/09/2000)  
!mpe4d2j + ho2 => ac3h5 + me2\*o + oh 1.000E+12 0.0  
8000.0 ! (07/09/2000)  
!mpe4d3j = ch3co2 + c4h6 1.300e+13 0.0  
3.590e+04 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (Rs+1,3-diene)  
!mpe4d2j = mp2d + c2h3 1.000E+12 0.0  
50000.0 ! (02/09/2000)

c4h6co+ch3o=>mpe4d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 13  
anc7 :oh+c3h6=c  
!!!!  
mpe3d+o=>mpe4d3j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+o=>mpe3d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+h=>mpe4d3j+oh 5.400e+04 2.60 1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+h=>mpe3d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+oh=>mpe4d3j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+oh=>mpe3d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+ho2=>mpe4d3j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+ho2=>mpe3d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe3d+oh=>ch3hco+mp3j 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
mpe3d+on=>c2h5+mp3\*o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !  
Heyberger et al., Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
!mpe3d+ch3o=>mpe4d3j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
!mpe3d+ch3o=>mpe3d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mpe3d + o2 = mpe4d3j + ho2 4.000E+12 0.0  
37000.0 !  
mpe3d + o2 = mpe3d2j + ho2 4.000E+13 0.0  
37300.0 !as mo+o2=mo2j+ho2  
!mpe3d + ch3 = mpe4d3j + ch4 1.000E+11 0.0  
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
!mpe3d + ch3 = mpe3d2j + ch4 1.000E+11 0.0  
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mpe3d + o = mp3j + ch3co 1.000E+11 0.0 -  
1050.0 !Mohammed (curran2000)  
mpe3d2j + h = mpe3d 1.000E+13 0.0  
0.0 ! (RT1)  
!mpe3d2j=c4h6co+ch3o  
!Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (R+etone/aldehyde)  
c4h6co+ch3o=>mpe3d2j 5.000e+11 0.00 -1.000e+03 13  
anc7 :oh+c3h6=c  
!!!!  
mpe2d+o=>mpe3d2j+oh 8.800e+10 0.70 3.250e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe2d+h=>mpe3d2j+h2 5.400e+04 2.50 -1.900e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe2d+oh=>mpe3d2j+h2o 3.000e+06 2.00 -1.520e+03 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
mpe2d+ho2=>mpe3d2j+h2o2 6.400e+03 2.60 1.240e+04 !  
Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs)  
!mpe2d+ch3o=>mpe3d2j+ch3oh 1.880e+12 0.00 1.200e+03 !  
Touchard et al., Int J Chem Kinet, 37 (2005) 451-463 (2Hs ally)  
mpe2d + o2 = mpe3d2j + ho2 4.000E+12 0.0  
37000.0 !  
!mpe2d + ch3 = mpe3d2j + ch4 1.000E+11 0.0  
7300.0 !Touchard et al., Proc Combust Inst, 30 (2005) 1073-1081 (2Hs ally)  
mpe2d + o = me2j + c2h5co 1.000E+11 0.0 -  
1050.0 !Mohammed (curran2000)







mb+ch3o=ch3oh+mb2j 3.800e+10 0.000 2800.0 !2 rnc7, anc7 tert  
mb+ch3o2=ch3o2h+mb2j 4.000e+12 0.000 14000.0 !2 same as ho2  
mb+h=h2+mb2j 2.520e+14 0.000 7300.0 !2 rnc7, anc7, ter  
!mb+h=h2+mb2j 1.000e+14 0.000 7300.0 ! changement Sandro Gail  
Sympto2006  
mb+ho2=h2o2+mb2j 4.320e+12 0.000 14400.0 !2 rnc7 tertiary  
mb+o=oh+mb2j 2.00e+12 0.000 32800.0 ! AS M0  
!mb+o2=ho2+mb2j 4.000e+13 0.000 41300.0 !2 rnc7 tertiary  
mb+o2=ho2+mb2j 4.000e+13 0.000 32800.0 !2 rnc7 tertiary  
mb+oh=h2o+mb2j 1.146e+11 0.510 63.0 !2 rnc7, anc7 tert  
mb+mb4oo=mb4ooh+mb2j 2.160e+12 0.000 14400.0 !2 new reaction pe  
mb+mb3oo=mb3ooh+mb2j 2.160e+12 0.000 14400.0 !2 new reaction pe  
mb+mb2oo=mb2ooh+mb2j 2.160e+12 0.000 14400.0 !2 new reaction pe  
mb+mbmoo=mbmoo+mb2j 2.160e+12 0.000 14400.0 !2 new reaction pe  
mb+c2h3o=c2h4+mbm2j 5.010e+11 0.000 18000.0 !2 rnc7\*\*, primary  
mb+c2h5o=c2h6+mbm2j 5.010e+10 0.000 13400.0 !2 rnc7\*\*, primary  
mb+ch3o=ch4+mbmj 4.520e-01 3.650 7154.0 !2 anc7, primary f  
mb+ch3o=ch3oh+mbmj 1.581e+11 0.000 7000.0 !2 rnc7\*\*, primary  
mb+ch3o2=ch3o2h+mbmj 8.400e+12 0.000 20440.0 !2 corrected to ag  
mb+h=h2+mbmj 9.400e+04 2.750 6280.0 !2 anc7, primary f  
mb+ho2=h2o2+mbmj 8.400e+12 0.000 20440.0 !2 anc7, primary f  
mb+o=oh+mbmj 9.650e+04 2.680 3716.0 !2 anc7, primary f  
!mb+o2=ho2+mbmj 3.000e+13 0.000 52800.0 !2 anc7, primary f  
mb+o2=mbmj+ho2 2.050e+13 0.0 4.91e+04 !Dayma et al.,  
Proc. Combust. Inst.  
mb+oh=h2o+mbmj 5.250e+09 0.970 1590.0 !2 rnc7\*\*, primary  
mb+mb4oo=mb4ooh+mbmj 2.800e+12 0.000 20440.0 !2 new reaction pe  
mb+mb3oo=mb3ooh+mbmj 2.800e+12 0.000 20440.0 !2 new reaction pe  
mb+mb2oo=mb2ooh+mbmj 2.800e+12 0.000 20440.0 !2 new reaction pe  
mb+mbmoo=mbmoo+mbmj 2.800e+12 0.000 20440.0 !2 new reaction pe  
mb+mbmoo=mbmoo+mbmj 2.800e+12 0.000 20440.0 !2 new reaction pe  
c2h5chco+ch3o=mb2j 5.000e+11 0.000 -1000.0 !3 anc7 :oh+c3h6ec  
mb2d+h=mb2j 1.000e+13 0.000 2900.0 !3 rnc7: h to int.  
mp2d+ch3=mb2j 1.000e+11 0.000 7600.0 !3 hc descr. of nc  
c3h6+ch3co2=mb3j 1.055e+11 0.000 7350.0 !3 anc7:ch3co+c2h4  
mb2d+h=mb3j 1.000e+13 0.000 2900.0 !3 rnc7: h to int  
mb3d+h=mb3j 1.000e+13 0.000 1200.0 !3 rnc7: h to term  
c2h4+me2j=mb4j 2.000e+11 0.000 7600.0 !3 hc descr. of nc  
mb3d+h=mb4j 1.000e+13 0.000 2900.0 !3 rnc7: h to int.  
ch2co+ch3o=me2j 5.000e+11 0.000 -1000.0 !3 anc7 :oh+c3h6ec  
co+ch3o=ch3co2 1.500e+11 0.000 3000.0 !3 ndme  
co2+ch3=ch3co2 1.500e+11 0.000 36730.0 !3 ndme  
c2h4+ch3co2=mp3j 2.110e+11 0.000 7350.0 !3 anc7:ch3co+c2h4  
mp2d+h=mp3j 1.000e+13 0.000 2900.0 !3 rnc7: h to int  
c2h5chco+h=c3h7co 1.000e+13 0.000 2900.0 !3 rnc7: h to int  
c2co+c2h5=c3h7co 1.000e+11 0.000 7600.0 !3 hc descr. of nc  
c3h7co+ch2o=mbmj 2.002e+12 0.000 24000.0 !3 anist: abs val  
mb4j=mb2j 1.786e+09 0.798 31736.3 !5 radicalc, rs fo  
mb4j=mb3j 1.639e+10 0.945 39319.5 !5 radicalc, rs fo  
mb4j=mbmj 4.547e+09 -0.544 18822.5 !5 radicalc, rs fo  
mb3j=mbmj 9.256e+09 -0.654 13897.0 !5 radicalc, rs fo  
mb3j=mb2j 1.414e+10 0.862 39467.5 !5 radicalc, rs fo  
mb2j=mbmj 8.495e+11 -0.507 21614.5 !5 radicalc, rs fo  
mb2d+ch3o=c5h7o2+ch4 1.000e+12 0.000 7300.0 !6 anc7  
mb3d+ch3o=c5h7o2+ch4 1.000e+12 0.000 7300.0 !6 anc7  
!mp2d+ch3o=>c2h3co+ch2o+ch4 4.520e-01 3.650 7154.0 !6 no allylic  
h on  
mb2d+h=c5h7o2+h2 3.700e+13 0.000 3900.0 !6 anc7  
mb3d+h=c5h7o2+h2 3.700e+13 0.000 3900.0 !6 anc7  
!mp2d+h=>c2h3co+ch2o+h2 9.400e+04 2.750 6280.0 !6 no allylic h  
on  
c5h7o2+oh=mb2d+o 7.000e+11 0.000 29900.0 !6 anc7; deliberat  
c5h7o2+oh=mb3d+o 7.000e+11 0.000 29900.0 !6 anc7; deliberat  
!mp2d+o=>c2h3co+ch2o+oh 9.650e+04 2.680 3716.0 !6 no allylic h  
on

mb2d+oh=c5h7o2+h2o 3.000e+13 0.000 1230.0 !6 anc7  
mb3d+oh=c5h7o2+h2o 3.000e+13 0.000 1230.0 !6 anc7  
!mb3d+oh=>mp3j+ch2o 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !Heyberger et al.,  
Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
!mb3d+oh=>mp3\*o+ch3 1.370e+12 0.00 -1.040e+03 !Heyberger et al.,  
Combust Flame, 126 (2001) 1780-1802  
mb2d+h2o=mb2ooh+mb2j 1.500e+11 0.000 14190.0 !6 anc7: c3h6+ho2=  
mb3d+h2o=>c5h7o2+h2o2 1.500e+11 0.000 14190.0 !6 anc7: c3h6+ho2=  
= !mp2d+h2o=>c2h3co+ch2o+h2o2 8.400e+12 0.000 20440.0 !6 no  
allylic h on  
mb3d+oh=mb3ooh4j 2.760e+12 0.000 -1042.0 !7 pitz propene oh  
mb2d+oh=mb2ooh3j 2.760e+12 0.000 -1042.0 !7 pitz propene oh  
mb2d+oh=mp2ooh3j 2.760e+12 0.000 -1042.0 !7 pitz propene oh  
mb3ooh4j+o2=mb3ooh4oo 1.000e+12 0.000 -1100.0 !7 pitz propene oh  
mb2ooh3j+o2=mb2ooh3oo 1.000e+12 0.000 -1100.0 !7 pitz propene oh  
mp2ooh3j+o2=mp2ooh3oo 1.000e+12 0.000 -1100.0 !7 pitz propene oh  
mb3ooh4oo=>mp3\*o+oh+ch2o 1.000e+12 0.000 28680.0 !7  
irreversible; p  
mb2ooh3oo=>me2\*o+oh+ch3co 1.000e+12 0.000 28680.0 !7  
irreversible; p  
mp2ooh3oo=>me2\*o+oh+ch2o 1.000e+12 0.000 28680.0 !7  
irreversible; p  
mb3d+o=mp3j+hco 1.580e+07 1.760 -1216.0 !7 marinov calc fr  
mb2d+o=me2j+ch3co 1.580e+07 1.760 -1216.0 !7 marinov calc fr  
mp2d+o=me2j+hco 1.580e+07 1.760 -1216.0 !7 marinov calc fr  
mb3d+o=me2j+ch2hco 2.505e+07 1.760 76.0 !7 marinov calc fr  
mb3d+o=>acro1+h+ch3co2 2.505e+07 1.760 76.0 !7 marinov calc fr  
mb2d+o=>ch3co2+ch3cho 5.010e+07 1.760 76.0 !7 marinov calc fr  
mp2d+o=>ch3co2+ch2hco 5.010e+07 1.760 76.0 !7 marinov calc fr  
c5h7o2+o2=ch2chco+ch3o 2.500e+13 0.000 45000.0 !8 rnc7, anc7  
ch2chcco+h=cjhchcco+h2 4.210e-03 4.620 2583.0 !8 anc7: h+c2h4  
=h2  
ch2chcco+oh=cjhchcco+h2o 1.010e+13 0.000 5955.0 !8 anc7:  
oh+c2h4=h  
ch2chcco+ch3=cjhchcco+ch4 3.31e+00 3.700 9500.0 !8 anc7: ch3  
+c2h4=  
ch2chcco+o=cjhchcco+oh 1.200e+11 0.700 8959.0 !8 anc7: c3h6+o  
=  
ch2chcco+ho2=cjhchcco+h2o2 8.500e+13 0.000 3.043e4 !8 revised  
by Pitz  
c2h2+hcco=cjhchcco 1.610e+40 -8.580 20331.0 !8 anist, delibera  
c2h3+hcco=ch2chcco 8.000e+12 0.000 0.0 !8 rnc7: larger al  
ch2chcco+hcco+ac3h5 1.100e+13 0.000 3400.0 !8 anc7: h+c2co=c  
ch2chcco+h=c2h4+hcco 1.100e+13 0.000 3400.0 !8 anc7: h+c2co=c  
ch2chcco+oh=hcco+ch3co 3.730e+12 0.000 -1013.0 !8 anc7:  
oh+c2co=c  
ch2chcco+oh=c3hcho+co 3.730e+12 0.000 -1013.0 !8 anc7:  
oh+c2co=c  
ch3+mp2d3j=mb2d 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
c2h3+me2j=mb3d 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
c2h3+ch3co2=mp2d 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
hco+c3h3o2=me2\*o 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
hco+mp3j=mb4\*o 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
nc3h7+chooco=mbm\*o 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
hco+chooco=me2\*om\*o 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
ch2hco+c3h3co2=mp3\*o 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
hco+me2j\*o=mp3\*o2\*o 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
hco+hco=chocho 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
ch3co+hco=c3hcocho 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
ch3+c2h3co=c2h5chco 1.000e+13 0.000 0.0 !9 ALLARA and shaw  
!mb4j+o2=mb4oo 4.500e+12 0.000 0.0 !10 nc7; primary  
!mbmj+o2=mbmoo 4.500e+12 0.000 0.0 !10 nc7; primary  
!mb3j+o2=mb3oo 7.540e+12 0.000 0.0 !10 nc7; secondary

!mb2j+o2=mb2oo 1.410e+13 0.000 0.0 !10 nc7; tertiary  
mb4oo+mb4j=mb4o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb4oo+mb3j=mb4o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb4oo+mb2j=mb4o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb4oo+mbmj=mb4o+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+mb4j=mb3o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+mb3j=mb3o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+mb2j=mb3o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+mbmj=mb3o+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+mb4j=mb2o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+mb3j=mb2o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+mb2j=mb2o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+mbmj=mb2o+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+mb4j=mbmo+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+mb3j=mbmo+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+mb2j=mbmo+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+mbmj=mbmo+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb4oo+ch3o=ch3o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb4oo+c2h5o=ch3ch2o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb4oo+ic3h7o=ic3h7o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb4oo+nc3h7o=nc3h7o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+ch3o=ch3o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+c2h5o=ch3ch2o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+ic3h7o=ic3h7o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb3oo+nc3h7o=nc3h7o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+ch3o=ch3o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+c2h5o=ch3ch2o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+ic3h7o=ic3h7o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo+nc3h7o=nc3h7o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+ch3o=ch3o+mbmo 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+c2h5o=ch3ch2o+mbmo 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+ic3h7o=ic3h7o+mbmo 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mbmoo+nc3h7o=nc3h7o+mbmo 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
c2h5o2+mb2j=ch3ch2o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
c2h5o2+mb3j=ch3ch2o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
c2h5o2+mbmj=ch3ch2o+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ch3o2+mb2j=ch3o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ch3o2+mb3j=ch3o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ch3o2+mb4j=ch3o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ch3o2+mbmj=ch3o+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ho2+mb2j=oh+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ho2+mb3j=oh+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ho2+mb4j=oh+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ho2+mbmj=oh+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ic3h7o2+mb2j=ic3h7o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ic3h7o2+mb3j=ic3h7o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ic3h7o2+mb4j=ic3h7o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
ic3h7o2+mbmj=ic3h7o+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
nc3h7o2+mb2j=nc3h7o+mb2o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
nc3h7o2+mb3j=nc3h7o+mb3o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
nc3h7o2+mb4j=nc3h7o+mb4o 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
nc3h7o2+mbmj=nc3h7o+mbmj 7.000e+12 0.000 -1000.0 !11 anc7  
mb2oo=mb2ooh3j 1.088e+12 0.000 29206.5 !12 paper rs values  
mb2oo=mb2ooh4j 6.097e+10 0.000 25076.0 !12 paper rs values  
mb2oo=mb2oohmj 3.165e+09 0.000 21803.5 !12 paper rs values  
mb3oo=mb3ooh2j 2.837e+12 0.000 27789.0 !12 paper rs values  
mb3oo=mb3ooh4j 8.669e+11 0.000 30876.5 !12 paper rs values  
mb4oo=mb4ooh2j 1.995e+11 0.000 21989.0 !12 paper rs values  
mb4oo=mb4ooh3j 1.088e+12 0.000 29206.5 !12 paper rs values  
mbmoo=mbmoooh2j 1.455e+10 0.000 19189.0 !12 paper rs values  
mb4oo+ho2=mb4ooh+o2 1.750e+10 0.000 -3275.0 !13 anc7  
mb3oo+ho2=mb3ooh+o2 1.750e+10 0.000 -3275.0 !13 anc7  
mb2oo+ho2=mb2ooh+o2 1.750e+10 0.000 -3275.0 !13 anc7

mbmoo+ho2=mbmoooh+o2 1.750e+10 0.000 -3275.0 !13 anc7  
mb4oo+h2o2=>mb4ooh+h2o 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mb4ooh+h2o2=>mb4oo+h2o2 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mb3oo+h2o2=>mb3ooh+h2o2 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mb3ooh+h2o2=>mb3oo+h2o2 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mb2oo+h2o2=>mb2ooh+h2o2 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mb2ooh+h2o2=>mb2oo+h2o2 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mbmoo+h2o2=>mbmoooh+h2o2 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mbmoooh+h2o2=>mbmoo+h2o2 2.400e+12 0.000 10000.0 !14 anc7:rnc7;  
one  
mb4oo+ch3o2=>mb4o+ch3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !15 anc7  
mb3oo+ch3o2=>mb3o+ch3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !15 anc7  
mb2oo+ch3o2=>mb2o+ch3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !15 anc7  
mbmoo+ch3o2=>mbmo+ch3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !15 anc7  
c2h5o2+mb4oo=>ch3ch2o+mb4o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
c2h5o2+mb3oo=>ch3ch2o+mb3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
c2h5o2+mb2oo=>ch3ch2o+mb2o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
c2h5o2+mbmoo=>ch3ch2o+mbmo+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
ic3h7o2+mb4oo=>ic3h7o+mb4o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreveri  
ic3h7o2+mb3oo=>ic3h7o+mb3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreveri  
ic3h7o2+mb2oo=>ic3h7o+mb2o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreveri  
ic3h7o2+mbmoo=>ic3h7o+mbmo+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreveri  
mb2oo+mb2oo=>o2+mb2o+mb2o 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mb2oo+mb3oo=>mb2o+mb3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mb2oo+mb4oo=>mb2o+mb4o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mbmoo+mbmoo=>mb2o+mbmo+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mb3oo+mb3oo=>o2+mb3o+mb3o 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mb3oo+mb4oo=>mb3o+mb4o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mb3oo+mbmoo=>mb3o+mbmo+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mb4oo+mb4oo=>o2+mb4o+mb4o 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
mbmoo+mbmoo=>o2+mbmo+mbmo 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreversi  
nc3h7o2+mb4oo=>nc3h7o+mb4o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreveri  
nc3h7o2+mb3oo=>nc3h7o+mb3o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreveri  
nc3h7o2+mb2oo=>nc3h7o+mb2o+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;  
irreveri  
nc3h7o2+mbmoo=>nc3h7o+mbmo+o2 1.400e+16 -1.610 1860.0 !16 anc7;

irrever  
mb4ooh=mb4o+h 1.500e+16 0.000 42500.0 !17 anc7, primary s  
mb3ooh=mb3o+h 9.450e+15 0.000 41600.0 !17 anc7, secondary  
mb2ooh=mb2o+h 5.950e+15 0.000 42540.0 !17 anc7, tertiary s  
mbmooh=mbmo+h 1.500e+16 0.000 42500.0 !18 anc7, primary s  
ch2o+mp3j=mb4o 1.500e+11 0.000 11900.0 !18 anc7, alk to te  
ch3hcco=me2j\*o+h2 1.500e+11 0.000 11900.0 !18 anc7, alk to e  
me2\*o+c2h5=mb2o 1.500e+11 0.000 11900.0 !18 anc7, alk to in  
mbm\*o+h=mbmo 6.628e+09 1.110 4226.0 !18 anist: calculat  
mb4\*o+h=mb4o 6.628e+09 1.110 4226.0 !18 anist: calculat  
mp3\*o+h=mp3j\*o+h2 1.500e+11 0.000 11900.0 !18 anc7, alk to in  
ethco+ch3co2=mb2o 1.500e+11 0.000 11900.0 !18 anc7, "alk" to  
ch2o+c3h3co2=mbmo 1.500e+11 0.000 11900.0 !18 anc7, "alk" to  
mb2oohmj=>mbcy2om+h 9.375e+09 0.000 7000.0 !19 hcn  
mb2ooh4j=>mbcy4o2+h 7.500e+10 0.000 15250.0 !19 hcn  
mb2ooh3j=>mbcy3o2+h 6.000e+11 0.000 22000.0 !19 hcn  
mb3ooh2j=>mbcy3o2+h 6.000e+11 0.000 22000.0 !19 hcn  
mb3ooh4j=>mbcy4o3+h 6.000e+11 0.000 22000.0 !19 hcn  
mb4ooh2j=>mbcy4o2+h 7.500e+10 0.000 15250.0 !19 hcn  
mb4ooh3j=>mbcy4o3+h 6.000e+11 0.000 22000.0 !19 hcn  
mbmooh2j=>mbcy2om+h 9.375e+09 0.000 7000.0 !19 hcn  
mb3d+h2o=mb4ooh3j 1.500e+11 0.000 7800.0 !20 anc7  
mb2d+h2o=mb3ooh2j 1.500e+11 0.000 7800.0 !20 anc7  
mb3d+h2o=mb3ooh4j 1.500e+11 0.000 7800.0 !20 anc7  
mb2d+h2o=mb2ooh3j 1.500e+11 0.000 7800.0 !20 anc7  
mb2ooh4j=>me2\*o+c2h4+h 5.916e+19 -1.870 30290.0 !21 anc7\*\*  
mb4ooh2j=>mp2d+ch2o+h 1.025e+20 -1.580 33380.0 !21 anc7\*\*  
mb2ooh3j+o2=mb2ooh3o 7.540e+12 0.000 0.0 !22 nc7, secondary  
mb2ooh4j+o2=mb2ooh4o 4.520e+12 0.000 0.0 !22 nc7, primary  
mb2oohmj+o2=mb2oohmo 4.520e+12 0.000 0.0 !22 nc7, primary  
mb3ooh2j+o2=mb3ooh2o 1.410e+13 0.000 0.0 !22 nc7, tertiary  
mb3ooh4j+o2=mb3ooh4o 4.520e+12 0.000 0.0 !22 nc7, primary  
mb4ooh2j+o2=mb4ooh2o 1.410e+13 0.000 0.0 !22 nc7, tertiary  
mb4ooh3j+o2=mb4ooh3o 7.540e+12 0.000 0.0 !22 nc7, secondary  
mbmooh2j+o2=mbmooh2o 1.410e+13 0.000 0.0 !22 nc7, tertiary  
mb2ooh3o=mb3ooh2\*o+h 1.419e+12 0.000 26151.0 !23 as in ro2  
isome  
mb2ooh4o=mb4ooh2\*o+h 9.976e+10 0.000 20351.0 !23 as in ro2  
isome  
mb2oohmo=mbmooh2\*o+h 7.275e+09 0.000 20190.7 !23 as in ro2  
isome  
mb3ooh2o=mb2ooh3\*o+h 5.440e+11 0.000 27915.0 !23 as in ro2  
isome  
mb3ooh4o=mb4ooh2d+h2o 1.995e+11 0.000 20351.0 !23 as in ro2  
isome  
mb3ooh4o=mb4ooh3\*o+h 5.440e+11 0.000 26151.0 !23 as in ro2  
isome  
mb4ooh2o=mb4ooh2d+h2o 1.088e+12 0.000 29206.5 !23 as in ro2  
isome  
mb4ooh2o=mb2ooh4\*o+h 4.065e+10 0.000 21863.0 !23 as in ro2  
isome  
mb4ooh3o=mb4ooh2d+h2o 2.837e+12 0.000 26151.0 !23 as in ro2  
isome  
mb4ooh3o=mb3ooh4\*o+h 5.779e+11 0.000 27663.0 !23 as in ro2  
isome  
mbmooh2o=mbmooh2d+h2o 1.088e+12 0.000 31846.2 !23 as in ro2  
isome  
mbmooh2o=mb2oohm\*o+h 2.110e+09 0.000 21703.0 !23 as in ro2  
isome  
mb2ooh3o=mb3ooh2o 7.275e+09 0.000 12700.0 !23 as in ro2  
isome !!!\*\*\*  
mb3ooh4o=mb4ooh3o 7.275e+09 0.000 12700.0 !23 as in ro2  
isome !!!\*\*\*  
mb4ooh2\*o=>ch2o+mp3j\*o+h 1.500e+16 0.000 42000.0 !24a anc7

prim  
mb4ooh2d=>ch2o+mp2d3j+h 1.500e+16 0.000 42000.0 !24a anc7 prim  
mb4ooh3\*o=>ch2o+mp3j\*o+h 1.500e+16 0.000 42000.0 !24a anc7  
prim  
mbmooh2\*o=>ch2o+baoj2\*o+h 1.500e+16 0.000 42000.0 !24a anc7  
prim  
mbmooh2d=>ch2o+baoj2d+h 1.500e+16 0.000 42000.0 !24a anc7  
prim  
mb3ooh2\*o=>mp3\*o2\*o+h2 1.050e+16 0.000 41600.0 !24a anc7  
sec  
mb3ooh4\*o=>me2j+chocho+h 1.050e+16 0.000 41600.0 !24a anc7 sec  
mb2ooh3\*o=>ch3co+h2 5.250e+15 0.000 41600.0 !24a anc7  
sec  
mb2ooh3\*o=>ch3cocho+ch3co2+h 5.250e+15 0.000 41600.0 !24a anc7  
sec  
mb2ooh4\*o=>me2\*o+c2h2+h2 1.050e+16 0.000 41600.0 !24a anc7  
sec  
mb2oohm\*o=>me2\*om\*o+c2h5+h 1.050e+16 0.000 41600.0 !24a anc7  
sec  
mbcy2om+h=>co2+sc3h5och2+h2 4.800e+08 1.500 2005.0 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy2om+h2=>co2+sc3h5och2+h2o 2.400e+06 2.000 -1192.2 !25 dbr,  
see shee  
mbcy2om+h2=>co2+sc3h5och2+h2o2 4.000e+12 0.000 13261.0 !25 my  
evans-po  
mbcy2om+h=>ch2o+c2h5coco+h2 2.400e+08 1.500 2005.0 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy2om+h2=>ch2o+c2h5coco+h2o 1.200e+06 2.000 -1192.2 !25 dbr,  
see shee  
mbcy2om+h2=>ch2o+c2h5coco+h2o2 2.000e+12 0.000 13261.0 !25 my  
evans-po  
mbcy4o2+h=>mp2d+hco+h2 4.800e+08 1.500 2785.0 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy4o2+h2=>mp2d+hco+h2o 2.400e+06 2.000 -1192.2 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy4o2+h2=>mp2d+hco+h2o2 4.000e+12 0.000 14398.0 !25 my  
evans-poly  
mbcy4o2+h=>c2h4+me2j\*o+h2 2.400e+08 1.500 2005.0 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy4o2+h2=>c2h4+me2j\*o+h2o 1.200e+06 2.000 -1192.2 !25 dbr,  
see sheet  
mbcy4o2+h2=>c2h4+me2j\*o+h2o2 2.000e+12 0.000 13261.0 !25 my  
evans-poly  
mbcy3o2+h=>ch3chcco+ch3co2+h2 4.800e+08 1.500 2005.0 !25 dbr,  
see sheet  
mbcy3o2+h2=>ch3chcco+ch3co2+h2o 2.400e+06 2.000 -1192.2 !25 dbr,  
see she  
mbcy3o2+h2=>ch3chcco+ch3co2+h2o2 4.000e+12 0.000 13261.0 !25 my  
evans-p  
mbcy4o3+h=>ch2o+mp2d3j+h2 4.800e+08 1.500 2875.0 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy4o3+h2=>ch2o+mp2d3j+h2o 2.400e+06 2.000 -1192.2 !25 dbr,  
see sheet  
mbcy4o3+h2=>ch2o+mp2d3j+h2o2 4.000e+12 0.000 14398.0 !25 my  
evans-poly  
mbcy4o3+h=>ch2co+me2j+h2 4.800e+08 1.500 2005.0 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy4o3+h2=>ch2co+me2j+h2o 2.400e+06 2.000 -1192.2 !25 dbr, see  
sheet  
mbcy4o3+h2=>ch2co+me2j+h2o2 4.000e+12 0.000 13261.0 !25 my  
evans-polya  
me2\*o+h=me2j\*o+h2 4.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7; aldehydic  
mb4\*o+h=mb4j\*o+h2 4.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7; aldehydic  
mbm\*o+h=mbmj\*o+h2 4.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7; aldehydic

me2\*om\*o+h=me2j\*om\*o+h2 4.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7;  
aldehydic  
me2\*om\*o+h=me2\*omj\*o+h2 4.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7;  
aldehydic  
mp3\*o+h=mp3j\*o+h2 4.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7; aldehydic  
mp3\*o2\*o+h=mp3j\*o2\*o+h2 4.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7;  
aldehydic  
chocho+h=coccho+h2 8.000e+13 0.000 4200.0 !26 anc7; aldehydic  
me2\*o+h=me2j\*o+h2o 2.690e+10 0.760 -340.0 !26 anc7; aldehydic  
mb4\*o+h=mb4j\*o+h2o 2.690e+10 0.760 -340.0 !26 anc7; aldehydic  
mbm\*o+h=mbmj\*o+h2o 2.690e+10 0.760 -340.0 !26 anc7; aldehydic  
me2\*om\*o+h=me2j\*om\*o+h2o 2.690e+10 0.760 -340.0 !26 anc7;  
aldehydic  
me2\*om\*o+h=me2\*omj\*o+h2o 2.690e+10 0.760 -340.0 !26 anc7;  
aldehydic  
mp3\*o+h=mp3j\*o+h2o 2.690e+10 0.760 -340.0 !26 anc7; aldehydic  
mp3\*o2\*o+h=mp3j\*o2\*o+h2o 2.690e+10 0.760 -340.0 !26 anc7;  
aldehydic  
me2\*o+h=me2j\*o+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7; aldehydic  
mb4\*o+h=mb4j\*o+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7; aldehydic  
mbm\*o+h=mbmj\*o+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7; aldehydic  
me2\*om\*o+h=me2j\*om\*o+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7;  
aldehydic  
me2\*om\*o+h=me2\*omj\*o+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7;  
aldehydic  
mp3\*o+h=mp3j\*o+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7; aldehydic  
mp3\*o2\*o+h=mp3j\*o2\*o+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7;  
aldehydic  
ch3cocho+ch3cocho+h 5.000e+12 0.000 1790.0 !26 anc7;  
aldehydic  
me2\*o+h=me2j\*o+h2o 2.800e+12 0.000 13600.0 !26 anc7;  
aldehydic  
mb4\*o+h=mb4j\*o+h2o 2.800e+12 0.000 13600.0 !26 anc7;  
aldehydic  
mbm\*o+h=mbmj\*o+h2o 2.800e+12 0.000 13600.0 !26 anc7;  
aldehydic  
me2\*om\*o+h2o=me2j\*om\*o+h2o2 2.800e+12 0.000 13600.0 !26 anc7;  
aldehydic  
me2\*om\*o+h2o=me2\*omj\*o+h2o2 2.800e+12 0.000 13600.0 !26 anc7;  
aldehydic  
mp3\*o+h2o=mp3j\*o+h2o2 2.800e+12 0.000 13600.0 !26 anc7;  
aldehydic  
mp3\*o2\*o+h2o=mp3j\*o2\*o+h2o2 2.800e+12 0.000 13600.0 !26 anc7;  
aldehydic  
co2+c2h5co=baoj2\*o 1.000e+11 0.000 30850.0 !27 since reaction  
co2+sc3h5=baoj2d 1.000e+11 0.000 9200.0 !27 hc descr. of hc  
co+c2h5co=c2h5coco 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
choocco+co=me2j\*om\*o 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
hco+co=coco 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
mp3j+co=mb4j\*o 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
c3h7co2+co=mbmj\*o 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
cocho+co2=me2\*omj\*o 1.500e+11 0.000 36730.0 !27 andme: co2+ch3=

ch3co2+co=me2j\*o 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
!c2h2+ch3co2=mp2d3j 1.610e+40 -8.580 20331.0 !27 anist,  
delibera  
co+me2j=mp3j\*o 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
ch2co+ch3co2=mp3j\*o 1.000e+11 0.000 7600.0 !27 hc descr. of nc  
me2j\*o+co=mp3j\*o2\*o 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
ch2co+ch3co2=mp3j\*o 1.000e+11 0.000 9200.0 !27 hc descr. of nc  
ch2o+sc3h5=sc3h5och2 7.500e+10 0.000 36730.0 !27 andme: co2+ch3=  
ocho+co=chooco 1.500e+11 0.000 3000.0 !27 andme: co+c3h3o=  
hco+co2=chooco 1.500e+11 0.000 36730.0 !27 andme: co2+ch3=  
ch3o+ch3oh = ch2oh+ch3oh 3.000E+11 0.00 4.074E+03  
rev / 1.549E+05 1.68 1.050E+04 /  
c2h5oh+c2h5 = pc2h4oh+c2h6 5.000E+10 0.00 1.340E+04  
rev / 6.995E+08 5.000E+10 0.00 2.699E+04 /  
c2h5oh+c2h5 = ch3chh+c2h6 5.000E+10 0.00 1.040E+04  
rev / 6.995E+10 0.00 2.399E+00 /  
c2h2+ch3 = ac3h4+h 6.740E+19 -2.08 3.159E+04  
rev / 1.149E+16 -0.70 1.579E+04 /  
c3h6 = ac3h5+h 2.010E+61 -13.26 1.185E+05  
rev / 4.887E+56 -12.25 2.808E+04 /  
!\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\*\* changes \*\*\*\*\*  
RAMIREZ\*\*\*\*\*  
!\*\*\*\*\*  
phch2+o2 => phcco+h 3.760e+15 -1.550  
11321.70  
phch2+o2 => c6h5o+ch2o 6.260e+37 -8.860  
16582.22  
phch3ch2+o => phch3hco+h 4.370e+18 -1.340  
1591.78  
phch3ch2+o => c6h4ch3+ch2o 5.990e+23 -2.470  
16192.64  
phch3ch2+o => toluen+hco 1.970e+22 -2.360  
8152.49  
phch3ch2+o2 => phch3hco+h 1.380e+02 2.420  
7440.25  
phch3ch2+o2 => oc6h4ch3+ch2o 6.570e+03 1.870  
5002.39  
phch3ch3 = c6h4ch3+ch3 4.320e+29 -3.580  
110164.91  
phch3ch2+h = c6h4ch3+ch3 5.830e+67 -14.150 68329.35  
phch3ch2+h2o => c6h4ch3+ch2o+h 3.130e+18 -1.440 13943.59  
phch3hco => c6h4ch3+co+h 2.100e+16 0.000 81739.96  
phch3hco+h => c6h4ch3+co+h2 4.900e+09 1.160 2404.40  
phch3hco+o => c6h4ch3+co+h 5.840e+12 0.000 1809.27  
phch3hco+h => c6h4ch3+co+h2 2.890e+08 1.350 -1572.66  
phch3hco+o2 => c6h4ch3+co+h2 1.200e+05 2.500 37554.97  
phch3hco+h2o => c6h4ch3+co+h2o 4.090e+04 2.500 10203.15  
phch3hco+ch3 => c6h4ch3+co+h4 3.490e-08 6.210  
1630.02!  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!c10h7ch3+o => napht+co+2h 1.100e+13  
0.000 4531.55  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!c10h7ch3+o => indenyl+ch3+co 1.470e+13  
0.000 4531.55  
c10h7ch2+o2 = c10h7hco+h 3.760e+15 -1.550  
11321.70  
c10h7ch2+o2 = A2-X+ch2o+o 6.32E+11 0.00



c10h20qjBqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjCqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjDqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjEqA=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjAqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjCqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjDqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjEqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjFqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjGqB=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjAqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjBqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjDqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjEqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjFqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjGqC=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjAqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjBqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjCqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjEqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjFqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjGqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjHqD=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjAqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjBqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjCqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjDqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjFqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjGqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjHqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0  
!  
c10h20qjIqE=>ch3o+3c2h4+c2h5+oh+co2 7.0E+15 0.00 42065.0

!  
END  
!//////////Bloc pression 1  
atm//////////  
ch3+oh=ch2oh+h 2.640E+19 -1.80 8068.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=ch3o+h 5.740E+12 -0.23 13931.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=sch2+h2o 7.200E+13 0.00 2780.0 !  
ch3+oh=c2h2+h2 3.190E+12 -0.53 10810.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
c2h5+o2=c2h4+ho2 3.000E+20 -2.86 6761.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c2h5+o2=c2h4o2h 1.300E+40 -9.41 11026.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c2h5+o2=ch3hco+oh 1.600E+14 -1.17 10391.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c2h3+o2=ch2hco+o 1.447E+15 -0.78 3135.0 !  
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=ch2o+hco 1.853E+23 -3.29 3892.0 !  
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=chocho+h 1.910E+18 -2.25 2398.0 !  
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=c2h2+h2o 5.190E+15 -1.26 3310.0 !  
1 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c3h3+c3h3=c6h5+h 1.697E+48 -9.977 36755.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
c3h3+c3h3=c6h6 3.160E+55 -12.55 22264.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
c3h3+c3h3=FULVENE 6.306E+59 -13.80 24953.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 2.5a51E+32 -6.352 5432.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 5.492E+62 -14.73 25602.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 3.018E+35 -7.37 5963.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
FULVENE=c6h6 1.445E+45 -8.90 96999.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
FULVENE=c6h5+h 2.239E+68 -14.65 142570.0 !  
latm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
nc4h5+c2h2=c6h6+h 7.829E+15 -1.00 8901.0 !  
latm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
nc4h5+c2h2=FULVENE+h 4.625E+15 -0.89 9143.0 !  
latm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
ic4h5+c2h2=c6h6+h 1.668E+23 -3.30 24961.0 !  
latm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
ic4h5+c2h2=FULVENE+h 6.805E+24 -3.45 20339.0 !  
latm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747

!//////////Bloc pression 10  
atm//////////  
c2h3+o2=ch2hco+o 1.176E+17 -1.36 5580.0 !  
10 atm divco by 3 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=ch2o+hco 9.275E+25 -3.96 7043.0 !  
10 atm times 2.5 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=chocho+h 7.780E+20 -2.94 5541.0 !  
10 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=c2h2+h2o 3.250E+19 -2.26 7932.0 !  
10 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
ch3+oh=ch2oh+h 1.990E+19 -1.68 11157.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=ch3o+h 9.950E+14 -0.82 16872.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=sch2+h2o 6.370E+18 -1.67 11141.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=ch2o+h2 7.390E+14 -1.13 14551.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
c2h5+o2=c2h4+ho2 1.010E+31 -5.81 15860.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c2h5+o2=c2h4o2h 2.370E+42 -9.65 16150.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c2h5+o2=ch3hco+oh 6.930E+17 -2.171 14020.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c3h3+c3h3=c6h5+h 3.671E+26 -3.879 28960.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
c3h3+c3h3=c6h6 3.888E+50 -11.01 20320.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
c3h3+c3h3=FULVENE 1.071E+61 -13.96 28084.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 3.204E+28 -5.043 4517.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 5.620E+60 -13.93 27093.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 7.975E+29 -5.50 4665.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
FULVENE=c6h6 2.951E+31 -4.97 88465.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
FULVENE=c6h5+h 8.511E+24 -2.505 113330.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
nc4h5+c2h2=c6h6+h 1.690E+16 -1.03 8968.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
nc4h5+c2h2=FULVENE+h 1.740E+19 -1.86 12384.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
ic4h5+c2h2=c6h6+h 8.250E+24 -3.76 26565.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
ic4h5+c2h2=FULVENE+h 9.738E+26 -3.76 21329.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
!//////////Bloc pression 100  
atm//////////

c2h3+o2=ch2hco+o 5.270E+21 -2.44 11329.0 !  
100 atm /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=ch2o+hco 1.010E+28 -4.54 12197.0 !  
100 atm times 2.5 /Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=chocho+h 8.900E+23 -3.70 11082.0 !  
100 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
c2h3+o2=c2h2+h2o 3.610E+23 -3.26 16383.0 !  
100 atm/Bozelli&Dean 1993, J. Phys.Chem.vol.97,pp.4427-4441  
ch3+oh=ch2oh+h 1.990E+19 -1.68 11157.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=ch3o+h 9.950E+14 -0.82 16872.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=sch2+h2o 6.370E+18 -1.67 11141.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
ch3+oh=ch2o+h2 7.390E+14 -1.13 14551.0 !  
(DEAN,10BAR 87)  
c2h5+o2=c2h4+ho2 1.010E+31 -5.81 15860.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c2h5+o2=c2h4o2h 2.370E+42 -9.65 16150.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c2h5+o2=ch3hco+oh 6.930E+17 -2.171 14020.0 !  
(90BoZ/D,10Bar)  
c3h3+c3h3=c6h5+h 3.671E+26 -3.879 28960.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
c3h3+c3h3=c6h6 3.888E+50 -11.01 20320.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
c3h3+c3h3=FULVENE 1.071E+61 -13.96 28084.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 3.204E+28 -5.043 4517.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 5.620E+60 -13.93 27093.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
c3h3+c3h3=FULVENE 7.975E+29 -5.50 4665.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
duplicate  
FULVENE=c6h6 2.951E+31 -4.97 88465.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
FULVENE=c6h5+h 8.511E+24 -2.505 113330.0 !  
10atm/miller&Klippenstein, J.Phys.Chem.A, 2003, pp. 7783-7799  
nc4h5+c2h2=c6h6+h 1.690E+16 -1.03 8968.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
nc4h5+c2h2=FULVENE+h 1.740E+19 -1.86 12384.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
ic4h5+c2h2=c6h6+h 8.250E+24 -3.76 26565.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747  
ic4h5+c2h2=FULVENE+h 9.738E+26 -3.76 21329.0 !  
10atm/Senosiain&miller, J.Phys.Chem.A, 2007, pp. 3740-3747



## Résumé

L'oxydation d'un gazole commercial et d'un gazole modèle (70% *n*-décane/30% 1-méthylnaphtalène en mol), ainsi que l'oxydation d'un carburant B30 « réel » (30% EMHV en vol.) et d'un B30 modèle (49% de *n*-décane, 21% de 1-méthylnaphtalène et 30% d'octanoate de méthyle en mole), a été étudiée dans un réacteur auto-agité par jets gazeux, un tube à choc et une bombe sphérique. Les études ont été effectuées dans un réacteur auto-agité en silice fondue, dans les mêmes conditions expérimentales initiales (560-1030 K, à 6 et 10 bar, à des richesses allant de 0,25 à 1,5). Les résultats de cette série d'expériences sont constitués de profils de concentration des espèces intermédiaires stables et des produits de combustion mesurés en fonction de la température, après prélèvement à basse pression par une sonde sonique, par infrarouge et par chromatographie en phase gazeuse. Les résultats obtenus avec les « carburants réels » ainsi qu'avec les carburants modèles (gazole et B30) ont été comparés, montrant que les carburants modèles sont d'excellents substituts simplifiés pour les « carburants réels » gazole et B30. Nous avons mesuré des délais d'auto-inflammation du carburant modèle B30 dans un tube à choc à haute pression dans une large gamme de conditions expérimentales (20 et 40 bar, intervalle de richesse de 0.5 à 1.5, et températures allant de 700 à 1200 K). Les vitesses fondamentales de flammes de 1-méthylnaphtalène, de l'octanoate de méthyle, et des carburants modèles gazole et B30 ont été mesurées dans une bombe sphérique, sous différentes conditions expérimentales (une pression initiale de 1 et 4 bar, une température initiale de 423K et une large gamme de richesses). Un mécanisme détaillé a été développé, validé, puis été réduit. Il prédit raisonnablement les données expérimentales obtenues en bombe sphérique dans cette étude.

---

**TITLE:** *Experimental and modeling study of the kinetics of oxidation, ignition and combustion of Diesel and biodiesel fuels.*

### ABSTRACT:

The oxidation of a commercial Diesel fuel and a Diesel surrogate fuel (70% *n*-decane/30% 1-methylnaphthalene in mole), a commercial B30 biodiesel fuel (30% FAME by vol.), and a B30 biodiesel surrogate fuel (49% *n*-decane, 21% 1-methylnaphthalene and 30% methyl octanoate, in mole) was studied using a jet-stirred reactor, a shock tube, and a spherical bomb. Experiments were performed in a fused-silica jet-stirred reactor under the same initial conditions (560–1030 K, 6 and 10 bar, equivalence ratios of 0.25–1.5). The results of this series of experiments consisted of concentration profiles of reactants, stable intermediates and products measured as a function of temperature by low-pressure probe sampling followed by Fourier transform infrared absorption spectrometry and gas chromatography analyses. The results obtained with the commercial and surrogate mixtures (diesel and B30 fuel) were compared with each other, showing that the fuel surrogates are excellent and simple fuel representatives. Ignition delay times of B30 surrogate fuels were measured in a high-pressure shock tube over a wide range of experimental conditions (pressures of 20 and 40 bar, equivalence ratios in the range 0.5–1.5, and temperatures ranging from 700 to 1200 K). Laminar flame speeds of 1-methylnaphthalene, methyl octanoate, Diesel surrogate (70% *n*-decane and 21% 1-methylnaphthalene in mole) and a B30 bio-Diesel surrogate have been investigated in a stainless steel spherical bomb under different experimental conditions (pressures of 1 and 4 bar, a temperature of 423K and a wide equivalence ratios range). A detailed chemical kinetic mechanism was developed, validated and reduced. It predicts reasonably well the present experimental results.

**DISCIPLINE:** Chimie

---

**MOTS CLES:** Biocarburants, Diesel, réacteur auto-agité, tube à choc, flamme, modélisation, cinétique

---

INSTITUT DE COMBUSTION, AEROTHERMIQUE, REACTIVITE ET ENVIRONNEMENT (ICARE) – CNRS – UPR 3021 – 1C, Avenue de la recherche scientifique – 45071 Orléans cedex 2.

