UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

ÉCOLE DOCTORALE ENERGIE, MATERIAUX, SCIENCES DE LA TERRE ET DE L'UNIVERS

Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement

THÈSE présentée par :

Florent KARSENTY

Soutenue le **25 septembre 2014**

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

Discipline/ Spécialité : Chimie-Physique

Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de carburants aéronautiques alternatifs synthétiques et de mélanges-modèles

THÈSE dirigée par :

P. DAGAUT	Directeur de recherche au CNRS d'Orléans

RAPPORTEURS :

F. BILLAUD	Directeur de recherche au CNRS de Nancy
E. THERSSEN	Professeur à l'Université de Lille I

JURY:

F. BILLAUD	Directeur de recherche au CNRS de Nancy
E. THERSSEN	Professeur à l'Université de Lille I
P. DAGAUT	Directeur de recherche au CNRS d'Orléans
G. DAYMA	Professeur à l'Université d'Orléans
Z. SERINYEL	Maître de conférences à l'Université d'Orléans
M. YAHYAOUI	Docteur, Ingénieur de recherche Airbus Group Innovations

AVANT PROPOS

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été réalisés au sein de l'institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement (ICARE) au CNRS d'Orléans sous la direction de Monsieur Philippe Dagaut, directeur de recherche au CNRS. Ils ont été financés par le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche. Je remercie Monsieur Iskender Gökalp, directeur de l'ICARE, de m'avoir accueilli au sein de ce laboratoire.

Je tiens à remercier tout particulièrement Monsieur Philippe Dagaut pour m'avoir accueilli au sein de l'équipe Oxydation des Hydrocarbure et m'avoir fait confiance durant ces trois années. Ses conseils et son expérience m'ont permis de mener à bien mes travaux de recherche. Mes remerciements vont également à Monsieur Guillaume Dayma pour m'avoir encadré pendant mon stage de master 2 et m'avoir donné l'envie de faire cette thèse. Je le remercie pour l'encadrement, les conseils avisés et l'aide précieuse qu'il a su me donner tout au long de cette thèse. Je remercie également Mme Zeynep Serinyel pour sa gentillesse et ses conseils.

Je souhaite exprimer ma gratitude à Monsieur Francis Billaud, Directeur de recherche au CNRS de Nancy et Monsieur Eric Therssen, Professeur à l'Université de Lille I qui ont accepté de consacrer une partie de leur temps pour juger ce travail et d'en être les rapporteurs. Je souhaite également remercier Monsieur Mohammed Yahyaoui, Ingénieur de recherche Airbus Groupe Inovations qui a accepté de participer à mon jury de thèse.

J'adresse mes plus sincères remerciements à Y. Fenard, mon colocataire de bureau et ami, pour son aide précieuse au quotidien, sa bonne humeur et ses conseils. Je tiens également à remercier C. Togbé, S. Thion, A. Mzé-Ahmed, A. Zaras ainsi que tous les autres membres de l'équipe OH.

Je souhaite également remercier tous les chercheurs et étudiants que j'ai pu rencontrer pendant ces trois années et avec lesquels j'ai partagé de si bons moments. Que soient également remerciés tous les membres du personnel technique et administratif qui ont participés au bon déroulement de cette thèse par leur disponibilité et leur bonne humeur.

Je tiens également à remercier mes amis de longue date pour leur soutien : Alex, Marion, Yohan, Cécilia, Emilien, Antoine, Greg…

Enfin, tous mes remerciements vont à mes parents, mes grands parents, mon frère et ma sœur qui ont toujours cru en moi et qui m'ont apporté leur inestimable soutien au cours de ces trois années. Mes remerciement et bien plus vont également à Claire pour son précieux soutien et son aide au quotidien. C'est à eux que je dédie cette thèse.

SOMMAIRE

Chapitre I : Contexte de l'étude

1.1 Motivations : Les contraintes de notre système énergétique 15
1.1.1 Limiter la consommation de pétrole 15
1.1.2 Le réchauffement climatique 17
1.1.2.1 L'effet de serre naturel 17
1.1.2.2 L'effet de serre anthropique 19
1.1.2.3 Cas du transport aérien 22
1.1.2.4 Lutte contre les émissions de gaz à effet de serre 24
1.1.3 Transport aérien et pollution atmosphérique 26
1.1.3.1 Les polluants liés au transport aérien 27
1.1.3.2 Les réglementations 30
1.2 Les carburants reformulés 32
1.2.1 Les carburants de synthèse - La synthèse Fischer-Tropsch 34
1.2.2 Composition chimique 36
1.2.3 Les biocarburants 37
1.3 Objectifs 39
1.4 Conclusion 40
Références bibliographiques 41

Chapitre II : Etude bibliographique

2.1 Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures 47
2.1.1 Domaine de basse température 48
2.1.2 Coefficient négatif de température (CNT) 50
2.1.3 Domaine de haute température 52
2.2 État de l'art sur la cinétique d'oxydation de kérosènes reformulés 53
2.2.1 Etudes expérimentales 54
2.2.1.1 Formation des suies 54
2.2.1.2 Détermination de délais d'auto-inflammation 56
2.2.1.3 Détermination de vitesse de flamme laminaire 61
2.2.1.4 Détermination de profils d'espèces 64
2.2.1.5 Récapitulatifs des données expérimentales 68
2.2.2 Etudes des mécanismes cinétiques 69
2.3 Conclusion 76
Références bibliographiques 77

Chapitre III : Dispositif expérimental

3.1 Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) 87
3.1.1 Principe du réacteur auto-agité 87
3.1.2 Description du réacteur auto-agité par jets gazeux 88
3.1.3 Calculs des débits gazeux 91
3.1.4 Prélèvements et échantillonnage des gaz de combustion 92
3.2 Techniques d'analyse des gaz de combustion 93
3.2.1 Spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier 93
3.2.1.1 Principe d'un spectromètre d'absorption IRTF 93
3.2.1.2 Principe de l'analyse quantitative par infrarouge 94
3.2.1.3 Construction de la méthode de dosage en IRTF 95
3.2.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse 96
3.2.2.1 Principe de la chromatographie en phase gazeuse 96
3.2.2.2 Analyse des composés hydrocarbonés 98
3.2.2.3 Analyse de l'oxygène et de l'hydrogène 98
3.3 Incertitude sur les résultats 98
3.4 Conclusion 100
Références bibliographiques 101

Chapitre IV : Modélisation

4.1 Le logiciel CHEMKIN 106
4.1.1 Le mécanisme réactionnel 107
4.1.2 Les données thermodynamiques 108
4.1.3 Le code de calcul Perfectly Stirred Reactor (PSR) 109
4.2 Développement d'un modèle cinétique 112
4.2.1 Sous-mécanismes C_0-C_4 113
4.2.2 Structure et développement du sous-mécanisme d'un hydrocarbure lourd 114
4.2.3 Mécanisme d'oxydation du kérosène 116
4.2.4 Mécanisme d'oxydation de kérosènes de synthèse 117
4.2.4.1 Mélange modèle d'oxydation du CtL Sasol 122
4.2.4.2 Mélange modèle d'oxydation du GtL Shell 125
4.2.4.3 Mélange modèle d'oxydation du SPK (IFP) 128

4.3 Conclusion 130

Références bibliographiques 131

Chapitre V : Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de composés purs

5.1 Résultats expérimentaux en réacteur auto-agité 137

5.1.1 Oxydation du 3-méthylheptane 138

5.1.1.1 Conditions expérimentales 138

5.1.1.2 Résultats expérimentaux 139

5.1.2 Oxydation du 2,5-diméthylhexane 143

5.1.2.1 Conditions expérimentales 144

5.1.2.2 Résultats expérimentaux 144

5.1.3 Oxydation du 2-méthylnonane 149

5.1.3.1 Conditions expérimentales 149

5.1.3.2 Résultats expérimentaux 150

5.1.4 Comparaison de l'oxydation des iso-paraffines 154

5.2 Modélisation de l'oxydation des composés purs en réacteur auto-agité et validation du modèle 157

5.2.1 Modélisation de l'oxydation du n-décane 157

5.2.2 Modélisation de l'oxydation de l'iso-octane 159

5.2.3 Modélisation de l'oxydation de n-propylcyclohexane 161

5.2.4 Modélisation de l'oxydation de n-propylbenzène 162

5.2.5 Modélisation de l'oxydation de 2-méthylheptane 164

5.2.6 Modélisation de l'oxydation de 3-méthylheptane 165

5.2.7 Modélisation de l'oxydation de la décaline 167

5.2.8 Modélisation de l'oxydation de la tétraline 169

5.3 Modélisation de délais d'auto-inflammation de composés purs et validation du modèle 170

5.3.1 Simulation des délais d'auto-inflammation du n-décane 171

5.3.2 Simulation des délais d'auto-inflammation du n-propylcyclohexane 171

5.3.3 Simulation des délais d'auto-inflammation du 3-méthylheptane 172

5.3.4 Simulation des délais d'auto-inflammation de la décaline 173

5.4 Conclusion 174

Références bibliographiques 176

Chapitre VI : Etude expérimentale de l'oxydation de kérosènes de synthèse et de mélanges d'hydrocarbures modèles

6.1 Etude expérimentale de l'oxydation de kérosènes de synthèse 181

6.1.1 Oxydation d'un kérosène de synthèse SPK pur 181

6.1.1.1 Conditions expérimentales 182

6.1.1.2 Résultats expérimentaux 183

6.1.2 Oxydation d'un kérosène de synthèse GtL pur 187

6.1.2.1 Conditions expérimentales 187

6.1.2.2 Résultats expérimentaux 188

6.1.3 Oxydation d'un kérosène de synthèse CtL pur 190

6.1.3.1 Conditions expérimentales 191

6.1.3.2 Résultats expérimentaux 191

6.2 Etude expérimentale de l'oxydation de mélange d'hydrocarbures modèles 193

6.2.1 Oxydation de mélanges modèles du SPK 193

6.2.1.1 Conditions expérimentales 194

6.2.1.2 Résultats expérimentaux 195

6.2.1.3 Comparaison expérimentale kérosène-mélanges 195

6.2.2 Oxydation de mélanges modèles du GtL 201

6.2.2.1 Conditions expérimentales 202

6.2.2.2 Résultats expérimentaux 203

6.2.2.3 Comparaison expérimentale kérosène-mélange 203

6.2.3 Oxydation de mélanges modèles du CtL 206

6.2.3.1 Conditions expérimentales 208

6.2.3.2 Résultats expérimentaux 209

6.2.3.3 Comparaison expérimentale kérosène-mélange 210

6.3 Conclusion 214

Références bibliographiques 216

Chapitre VII : Modélisation cinétique de l'oxydation de mélanges modèles et de kérosènes de synthèse

7.1 Modélisation cinétique de l'oxydation de mélanges d'hydrocarbures 219

7.1.1 Oxydation des mélanges modèles du GtL 219

7.1.1.1 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #0 220

7.1.1.2 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #1 223

7.1.2 Oxydation des mélanges modèles du CtL 226

7.1.2.1 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #0..... 226
7.1.2.2 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #1..... 229
7.1.2.3 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #2..... 232
7.1.3 Conclusion sur la validation du modèle en mélange de composés purs .. 235
7.2 Modélisation cinétique de l'oxydation de kérosènes de synthèse 235
7.2.1 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse SPK 236
7.2.2 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse GtL 245
7.2.3 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse CtL 251
7.3 Conclusion 257
Références bibliographiques 259

Conclusion

Conclusion générale et perspectives 262

Annexes

Annexe-I : Caractéristiques des appareils utilisés 271

Annexe-II : Récapitulatif des expériences effectuées en réacteur parfaitement agité 273

Annexe-III : Mécanisme cinétique 275

Annexe-IV : Données thermodynamiques 341

Chapitre I

Contexte de l'étude

1 Contexte de l'étude 15

1.1 Motivations : Les contraintes de notre système énergétique 15

1.1.1 Limiter la consommation de pétrole 15

1.1.2 Le réchauffement climatique 17

1.1.2.1 L'effet de serre naturel 17

1.1.2.2 L'effet de serre anthropique 19

1.1.2.3 Cas du transport aérien 22

1.1.2.4 Lutte contre les émissions de gaz à effet de serre 24

1.1.3 Transport aérien et pollution atmosphérique 26

1.1.3.1 Les polluants liés au transport aérien 27

1.1.3.2 Les réglementations 30

1.2 Les carburants reformulés 32

1.2.1 Les carburants de synthèse - La synthèse Fischer-Tropsch 34

1.2.2 Composition chimique 36

1.2.3 Les biocarburants 37

1.3 Objectifs 39

1.4 Conclusion 40

Références bibliographiques 41

1 Contexte de l'étude

1.1 Motivations : Les contraintes de notre système énergétique

1.1.1 Limiter la consommation de pétrole

Au cours de ces dernières années, l'augmentation de la population, la croissance économique et l'évolution technologique ont été des facteurs très importants de la croissance de la demande énergétique planétaire [1]. La plupart des scénarii mis au point par les économistes parlent d'une croissance régulière pour les vingt prochaines années. Dans ce bilan, les énergies nucléaire et renouvelables (biocarburants, éolien, hydraulique, solaire...), bien qu'en pleine expansion, resteront marginales face aux énergies fossiles (Figure I.1) [2]. Le pétrole restera donc prépondérant dans les décennies à venir, même si sa part est appelée à diminuer dans le bilan énergétique mondial d'ici 2035, y compris en France, dans l'hypothèse d'une confirmation du choix du nucléaire et plus encore en cas de sortie de cette filière (Figure I.2). L'Agence Internationale de l'Énergie (AIE) prévoit ainsi qu'à l'horizon 2035 le pétrole devrait fournir encore 80% de l'énergie nécessaire au transport en Europe, du fait notamment d'une augmentation de la demande dans le transport maritime et aérien international.

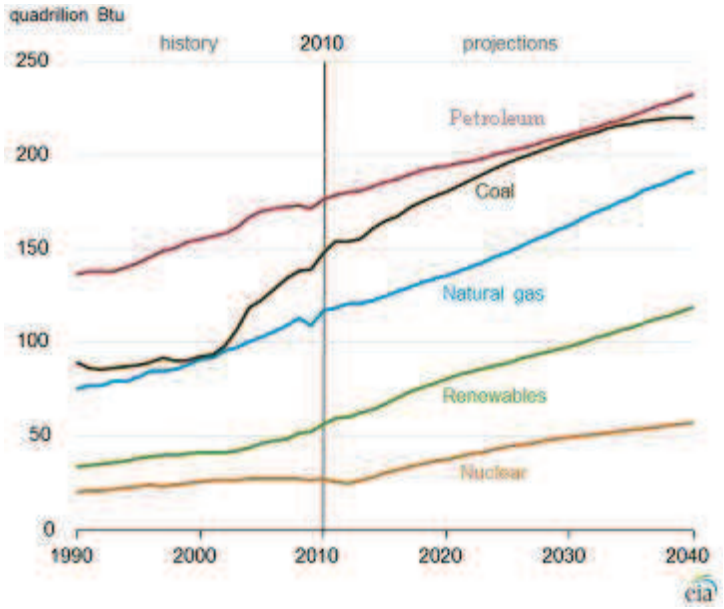


Figure I.1 : Consommation mondiale d'énergie par type de carburant [2]

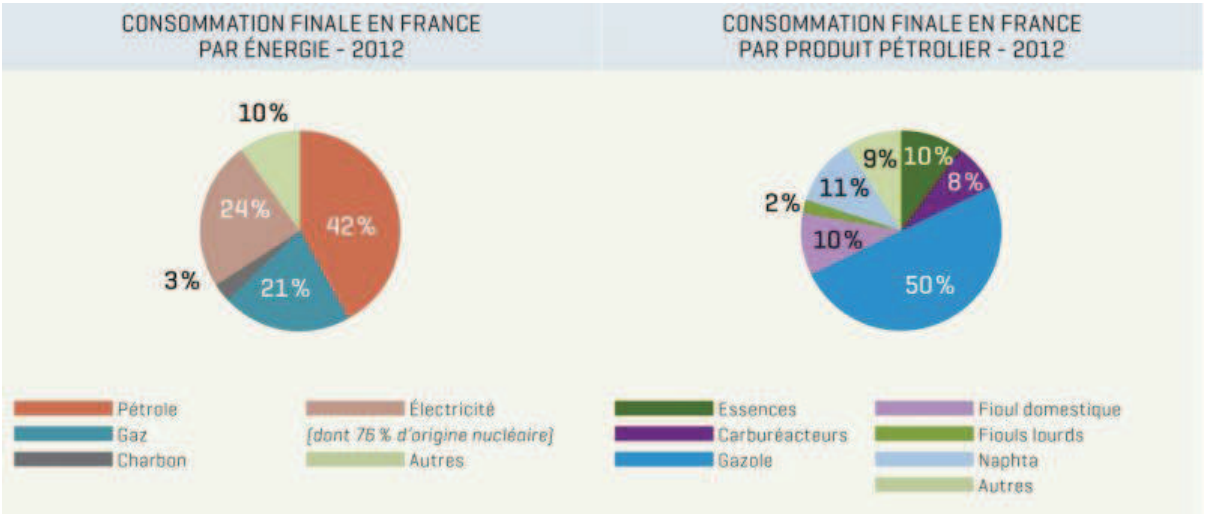


Figure I.2 : Consommation d'énergie en France [1]

Selon l'AIE, la demande énergétique mondiale devrait ainsi augmenter de 35% entre 2011 et 2035, principalement du fait des pays émergents où elle devrait croître de 50% alors qu'elle devrait rester stable dans les pays de l'OCDE (Organisation de Coopération et de Développement Economiques). Cependant, dans le même temps, l'homme prend de plus en plus conscience que les ressources fossiles ne sont pas inépuisables. Ce paradoxe entre la forte dépendance pétrolière du secteur énergétique et les réserves déclinantes en hydrocarbures peut aboutir à une situation internationale extrêmement tendue [3]. Il est donc primordial de prendre des mesures strictes pour palier au problème d'épuisement des ressources de pétrole.

Le kérosène, et notamment celui appelé Jet A-1, est le carburant utilisé dans le secteur aéronautique. Selon l'organisation commerciale internationale de sociétés de transport aérien l'IATA (International Air Transport Association), près de trois milliards de personnes ont été transportées en toute sécurité par avion en 2012 et ce chiffre est en croissance constante (Figure I.3). Cette activité a été possible grâce à quelques 57 millions d'emplois générant une activité économique de 2,2 billions de dollars, soit environ 3,5 % du PIB mondial [4].

La demande mondiale de kérosène ne fait qu'augmenter. Elle est d'environ 5 millions de barils par jour, ce qui correspond approximativement à 6% de la consommation mondiale de pétrole [5]. Les premiers consommateurs de kérosène dans le monde sont les Etats-Unis qui consomment approximativement 37% du kérosène total mondial [6].

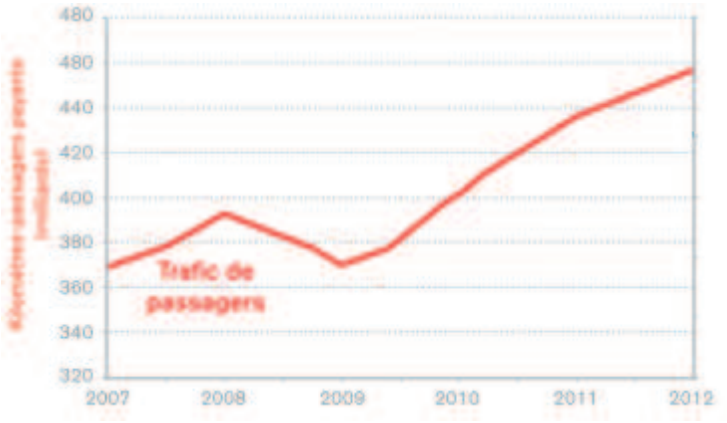


Figure I.3 : Trafic total de passagers désaisonnalisé [4]

1.1.2 Le réchauffement climatique

1.1.2.1 *L'effet de serre naturel*

L'effet de serre est un phénomène naturel et essentiel pour le maintien de la vie sur terre. En effet, sans cet effet de serre la température moyenne sur terre serait proche de -18°C alors qu'elle est située en réalité aux alentours de +15°C.

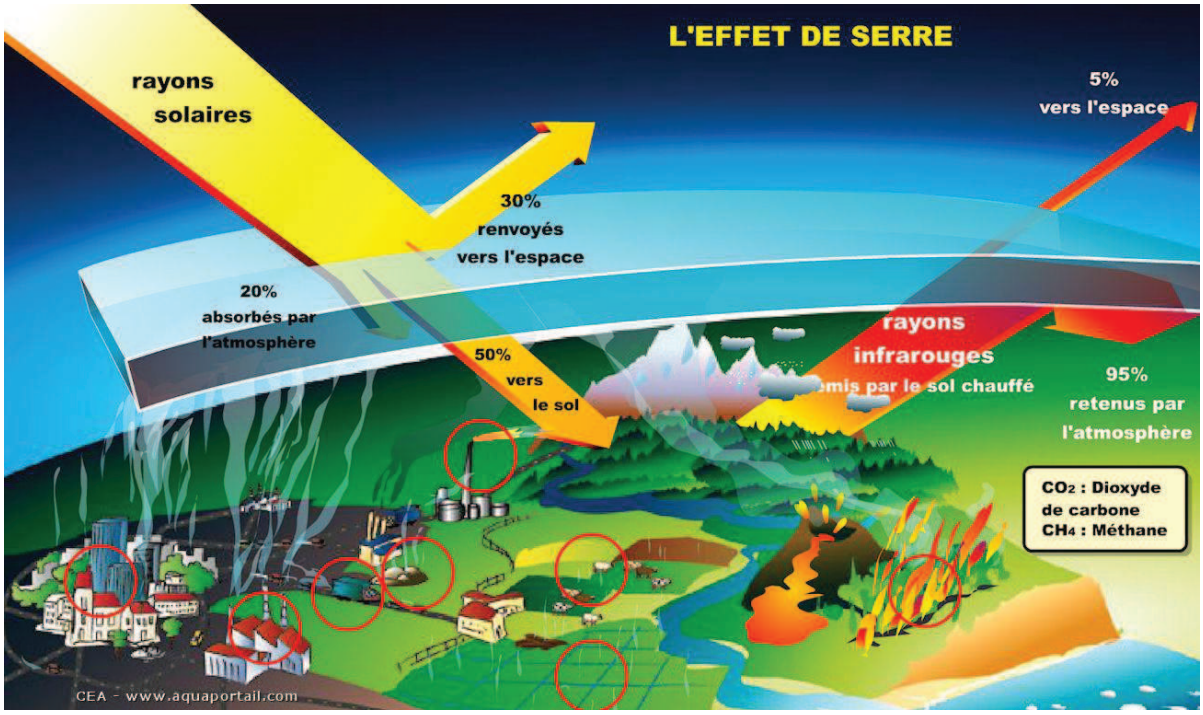


Figure I.4 : Principe de l'effet de serre naturel [7]

Seulement une partie du rayonnement solaire incident atteint la surface de la terre (environ 50%) (Figure I.4). Ce rayonnement qui arrive à la surface est alors soit réfléchi soit absorbé par le sol selon les propriétés de celui-ci. Ce ratio est caractérisé par l'albédo qui est le rapport de l'énergie lumineuse réfléchie par une surface sur l'énergie lumineuse incidente et est compris entre 0 (corps noir) et 1 (miroir parfait). L'énergie lumineuse absorbée par le sol va ainsi réchauffer celui-ci pour ensuite être réémise sous forme de rayonnement infrarouge. Certains gaz contenus dans l'atmosphère terrestre vont alors absorber une partie de ce rayonnement infrarouge émis par le sol. Lorsque ces molécules vont se débarrasser de cette énergie excédentaire piégée dans les basses couches de l'atmosphère, la température moyenne va augmenter.

Les molécules les plus importantes naturellement responsables de ce phénomène sont la vapeur d'eau (H_2O), le dioxyde de carbone (CO_2) et le méthane (CH_4). Cependant ces gaz ne sont pas les seuls gaz atmosphériques à jouer un rôle dans le réchauffement global par l'effet de serre. Le protoxyde d'azote (N_2O), l'ozone (O_3) et l'hexafluorure de souffre (SF_6) sont des gaz présents en plus faible quantité mais qui ont un rôle non négligeable dans l'effet de serre naturel. La faculté de ces gaz à participer au phénomène d'effet de serre dépend non seulement de leur concentration mais aussi de leur pouvoir de réchauffement (PGR) (Tableau I.1). Le PGR est défini comme la puissance radiative renvoyé vers le sol cumulé sur une durée de 100 ans (durée de séjour du CO_2 dans l'atmosphère) rapporté sur celui du CO_2.

Tableau I.1 : Pouvoir de réchauffement global (PGR) des principaux gaz à effet de serre (GIEC 2007 [8])

Composé	CO_2	CH_4	N_2O	SF_6
PGR	1	25	298	22800

Cependant, il est difficile de chiffrer l'impact réel de l'eau sur le réchauffement climatique. En effet, un phénomène appelé « rétroaction positive de la vapeur d'eau » joue un rôle sur le réchauffement climatique. Ce phénomène correspond à l'augmentation de température due aux émissions anthropiques qui entraîne une augmentation de l'évaporation de l'eau, et donc de la concentration en vapeur d'eau de l'atmosphère. Cela mène à une nouvelle hausse de température et rend donc l'impact de l'eau sur le réchauffement climatique difficilement estimable. Cependant, des études ont montrées que ce phénomène pouvait avoir une influence jusqu'à multiplier par 2,5 l'effet de serre anthropique initial [9].

On peut ainsi estimer la participation à l'effet de serre de chaque gaz cités précédemment. On peut voir sur la figure I.5 que l'eau est responsable de plus de la moitié de l'effet de serre naturel.

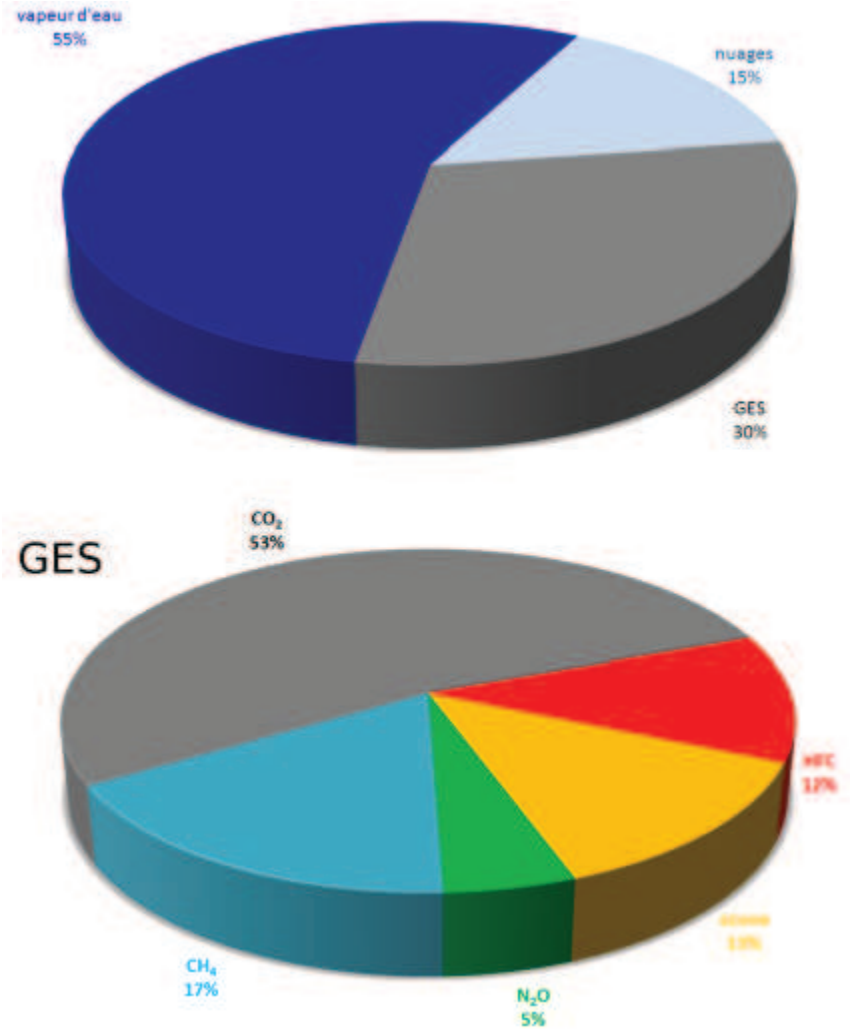


Figure I.5 : Répartition des contributions à l'effet de serre des différents gaz atmosphériques [8]

1.1.2.2 *L'effet de serre anthropique*

L'effet de serre naturel est donc un phénomène bénéfique et essentiel à la vie terrestre. Cependant, un autre effet de serre dit anthropique est loin d'avoir les mêmes effets bienfaisants du précédent. Celui-ci correspond à l'effet de serre engendré par les émissions provenant de l'activité humaine. En effet, l'activité humaine et en particulier la combustion de

matière fossile carbonée, telle que la combustion d'hydrocarbures dans la chambre de combustion d'un moteur type turboréacteur ou moteur automobile, participe au réchauffement climatique terrestre.

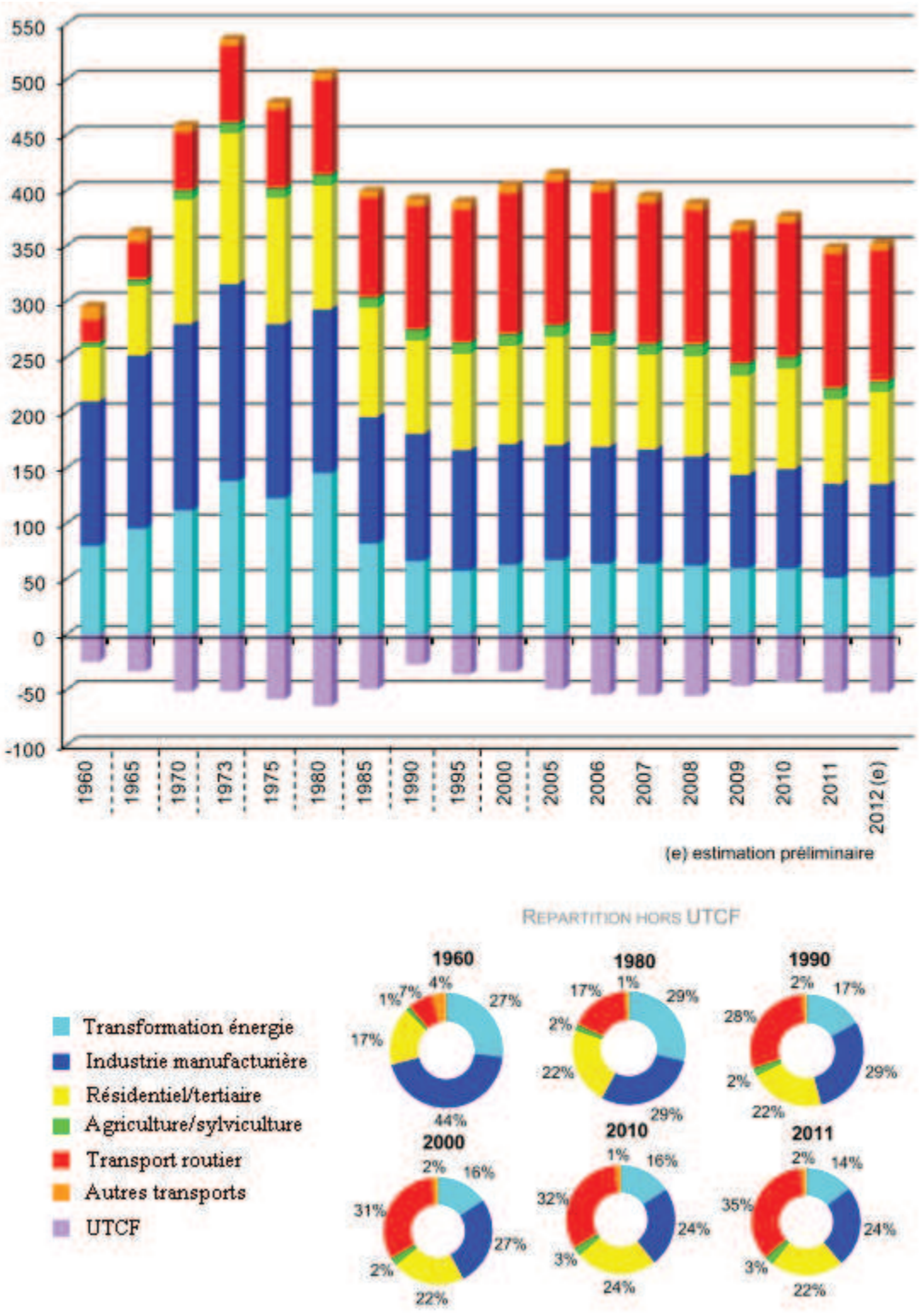


Figure I.6 : Emissions atmosphériques par secteur en France métropolitaine, hors UTCF (en Mt) [10]

La combustion de carburants fossiles forme de nombreux composés, dont certain sont considérés comme étant des gaz à effet de serre. L'activité humaine entraîne ainsi une augmentation de la concentration de ces gaz dans l'atmosphère d'où un accroissement de l'effet de serre de la planète. Parmi les rejets mis en cause on trouve principalement le dioxyde de carbone (Figure I.5) qui présente entre autre une longue durée de vie dans l'atmosphère. De plus, comme vu plus haut, la « rétroaction positive de la vapeur d'eau » participe au réchauffement climatique par effet de serre anthropique. En effet, l'activité humaine engendre une élévation de la quantité d'eau dans l'atmosphère, ce qui entraîne une nouvelle élévation de température de la planète.

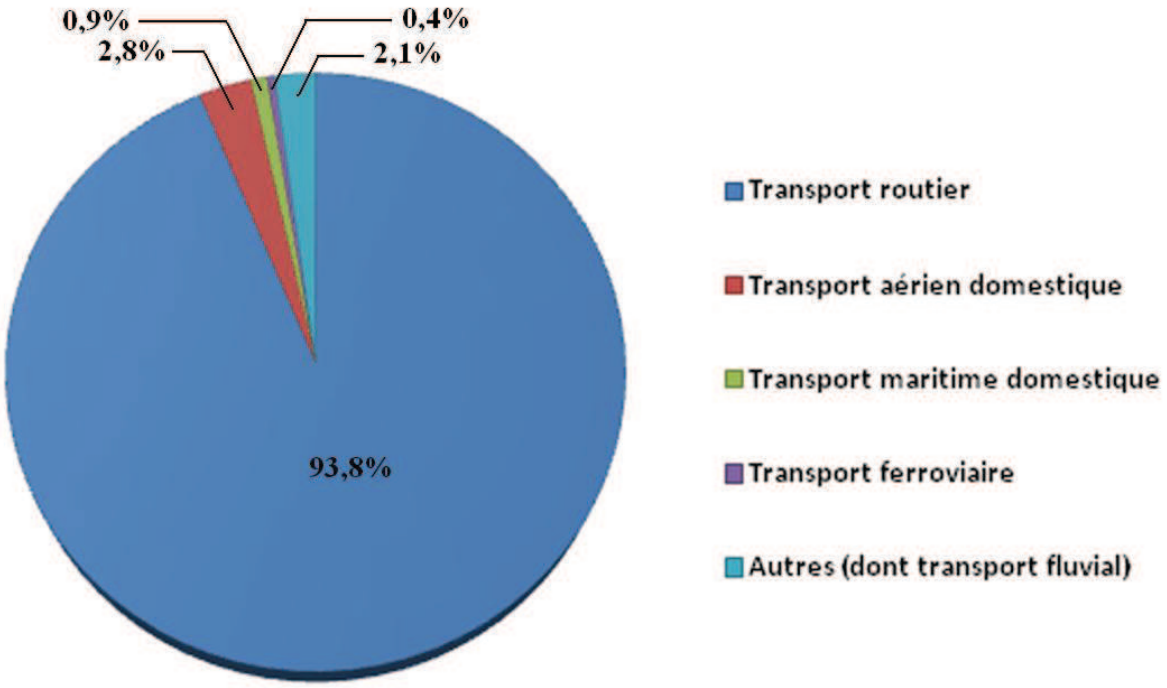


Figure I.7 : Les émissions françaises de CO_2 dans les transports [10]

Le secteur des transports tient une place majeure dans l'émission de gaz à effet de serre dans le monde. Il est de plus en majeure partie responsable de l'épuisement des ressources pétrolières. En France, le secteur des transports est responsable d'environ 37% des émissions de CO_2, devant l'industrie, le résidentiel et les transformations d'énergie (Figure I.6). Le transport routier représente quasiment 94% de ces émissions en comparaison des autres modes de transport tel que le transport aérien qui représente 2,8% (Figure I.7), hors émissions maritimes et aériennes internationales.

1.1.2.3 *Cas du transport aérien*

Grâce aux évolutions technologiques, l'accroissement des émissions de dioxyde de carbone à légèrement diminué ces dernières années dans le cas du transport routier. Cependant, le fort développement du secteur aéronautique au point de vue mondial a eu pour conséquence une augmentation constante des rejets en CO_2 dans l'atmosphère. Ils se sont accrus d'environ 87% depuis 1990.

Aujourd'hui, ces rejets représentent 2,6% des émissions mondiales de CO_2 [11], soit malgré tout quelque 650 millions de tonnes de CO_2 émis chaque année dans l'atmosphère par le milliard de litres de kérosène utilisés quotidiennement par l'aviation civile. Le Comité de protection de l'environnement en aviation (CAEP) estime que les émissions dépasseront le milliard de tonnes d'ici 2020, soit 3,2% des émissions globales de CO_2 [12]. Un rapide calcul montre en effet que la consommation moyenne d'un avion moderne est de l'ordre de 5 litres aux 100 km par passagers.

En France, le transport aérien intérieur et le secteur des transports ont été respectivement à l'origine de 1,4% et 36% des émissions de CO_2 au cours de l'année 2012. Le transport aérien intérieur a émis au cours de cette même année 5,1 millions de tonnes (Mt) de CO_2. Dans une vision plus large, les émissions totales de CO_2 du transport aérien de France comprennent en plus celles liées au trafic international. En les intégrant, les émissions globales se sont élevées à 21,4 Mt en 2012, mais en diminution de -1,8% par rapport à l'année précédente. Cette baisse est encourageante car comme on peut le voir sur le tableau I.2, les émissions de CO_2 de l'aviation en France ont progressé de +62% depuis 1990, pour un nombre de passagers-kilomètres-transportés (PKT) en croissance de 159% sur la période équivalente. Les émissions du transport aérien international (16,3 millions de tonnes de CO_2) représentent 76% des émissions totales du transport aérien en France.

Tableau I.2 : Emissions de CO_2 de transport aérien français [10]

Millions de tonnes CO_2	1990	2000	2008	2009	2010	2011	2012
Transport aérien intérieur	4,3	6,2	4,8	4,7	4,7	5,0	5,1
Transport aérien international	9,0	14,5	17,6	16,2	16,2	16,8	16,3
Total aérien (France)	13,3	20,7	22,4	20,9	20,9	21,8	21,4

Des mesures ont montrées que les teneurs préindustrielles de CO_2 étaient 30% inférieures à celles d'aujourd'hui, et relativement stables autour d'une valeur moyenne de 280 ppmv d'après la glace antarctique (Figure I.8) [13]. Cette augmentation au cours des derniers 200 ans est le fruit de l'activité humaine et résulte majoritairement de la combustion des énergies fossiles (pétrole, charbon, gaz), de la fabrication du ciment et de la déforestation.

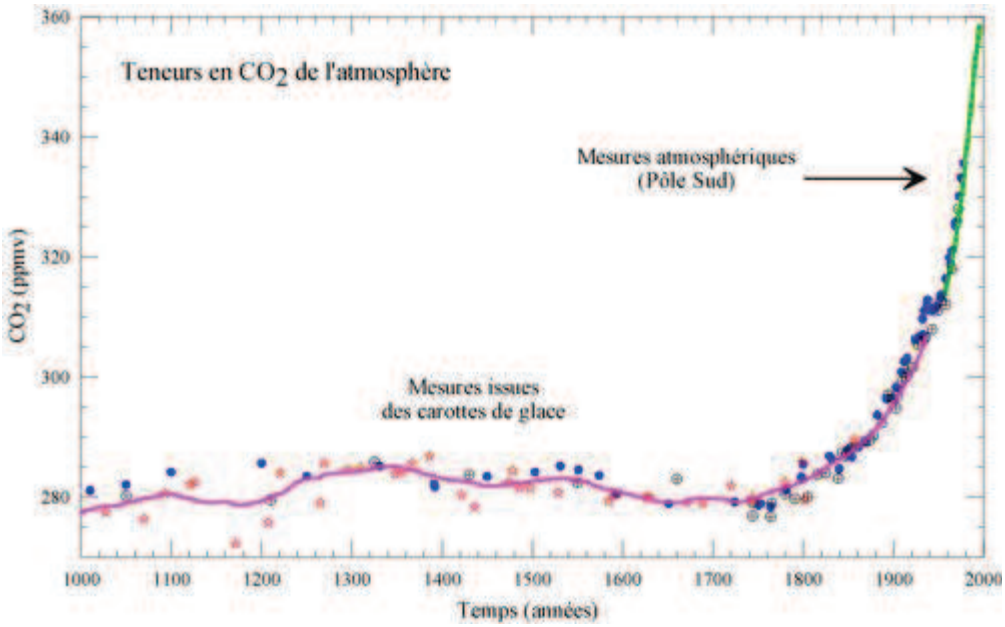


Figure I.8 : Courbe d'évolution du CO_2 au cours du dernier millénaire [13]

Une corrélation a pu être admise entre la température moyenne du globe et la concentration en dioxyde de carbone dans l'atmosphère. Ainsi, en augmentant la concentration en gaz à effet de serre dans l'atmosphère, l'activité humaine contribue aux changements climatiques.

Le dioxyde de carbone n'est pas le seul gaz à effet de serre impacté par les activités humaines. En effet, les aéronefs jouent un rôle important sur la formation d'ozone (O_3) atmosphérique, les traînées de condensation et l'augmentation de la nébulosité en cirrus. Il en résulte une amplification de l'effet de serre. Ces phénomènes seraient responsables d'environ 3% du forçage radiatif total issus de toutes les activités anthropogènes, d'après le Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Evolution du Climat (GIEC). Cependant, ce pourcentage n'inclut pas l'action des aéronefs sur la nébulosité en cirrus, or ceci participe aussi à l'effet de serre.

L'accroissement de la température moyenne du globe résultant des émissions de gaz à effet de serre anthropiques, telles que l'accroissement de la concentration en CO_2 due aux activités humaines, aura des conséquences néfastes sur la biodiversité des écosystèmes. Il contribuera de plus à une accélération de la fonte de la banquise, au retrait des glaciers, à une élévation du niveau moyen des océans et à une modification de la circulation des courants marins. Il pourrait de plus provoquer une augmentation de la fréquence et de l'intensité de phénomènes climatiques tels que les cyclones, les ouragans, les inondations et les périodes de sécheresse. Enfin, les océans sont les principaux puits de carbone et vont absorber une grande partie du CO_2 atmosphérique (d'origine naturelle et anthropique). Cela entraînera une diminution du pH des océans et cette acidification pourra causer de nombreux problèmes pour la faune marine.

1.1.2.4 *Lutte contre les émissions de gaz à effet de serre*

La population prenant de plus en plus conscience de l'importance de la protection de l'environnement, des mesures ont été adoptées pour diminuer les émissions de gaz à effet de serre afin de lutter contre le réchauffement climatique. Ces mesures ont été prises dans le cadre de la Convention Cadre des Nations Unies sur les Changements Climatiques (CCNUCC).

La première étape fut la création dès 1968 du « club de Rome », organisation non gouvernementale regroupant scientifiques, économistes, hommes d'affaires, fonctionnaires, etc. La démarche la plus significative de cette prise de conscience fut la mise en place du protocole de Kyoto qui a été signé le 11 décembre 1997, visant à réduire considérablement les GES d'ici 2012. Les pays ayant ratifiés le protocole avaient pour objectif de réduire de 5,2% leurs rejets de GES par rapport à leur niveau de 1990. Cependant, les rejets de GES du transport aérien n'étaient pas inclus dans le domaine d'application du protocole de Kyoto. L'Union Européenne, de façon à régulariser cela, avait ainsi décidé d'inclure les rejets provenant de l'aviation dans le Système Communautaire d'Echange de Quotas d'Emissions (SCEQE) le 8 juillet 2008. Ces émissions ayant pour origine le secteur aérien ont été prises en compte par le système à partir du 1er janvier 2012. Le SCEQE est le principal outil de l'Union Européenne dans sa politique de réduction des émissions de GES. L'UE s'est fixée, dans le cadre de l'ACARE (Advisory Council for Aeronautics Research in Europe), l'objectif

d'améliorer les performances des aéronefs qui seront produits en 2020 par rapport à ceux de 2005, en diminuant de 50% les émissions de CO_2, de 50% les niveaux de bruit et de 80% les émissions d'oxydes d'azote (NO_x) [14]. D'autres progrès technologiques sont attendus, notamment en matière de motorisation où le développement de la technologie Open Rotor pourrait diminuer encore les émissions de CO_2, sous réserve que cette technologie n'entraîne pas d'accroissement du niveau de bruit perçu. Tous ces progrès pourraient avoir un impact très important sur la consommation de carburant. En effet, un avion moderne et économe comme l'A380 consomme aujourd'hui environ 3 litres de kérosène pour transporter un passager sur 100 km, contre 12 pour un aéronef dans les années 1960.

Une seconde période d'engagement du protocole de Kyoto a été fixée lors de la Conférence de Doha en décembre 2012 et s'étend du 1er janvier 2013 au 31 décembre 2020. A ce jour, 195 « Parties » (194 États et l'Union européenne) ont déposé leurs instruments de ratification, à l'exception notable des Etats-Unis. En effet, le protocole a été signé sous la présidence Clinton mais n'a jamais été ratifié par le Sénat américain, alors que l'Amérique est le premier pays émetteur de GES. Le Japon, la Russie, le Canada et la Nouvelle-Zélande ont refusé de poursuivre leurs efforts de réduction dans un cadre ne s'appliquant pas à la Chine et aux Etats-Unis. De ce fait, les signataires ne représentent plus que 15% des émetteurs de gaz à effet de serre.

L'industrie aéronautique a également progressé en 2012 dans son engagement environnemental. En effet, elle poursuit ses efforts dans le but d'atteindre ses objectifs d'amélioration annuelle de l'efficacité énergétique de 1,5 % d'ici 2020, de croissance neutre en carbone à partir de 2020 (stratégie CNG2020) et de réduction de 50 % des émissions nettes d'ici 2050, par rapport à 2005 [4]. L'aviation est à l'origine de 2 % des émissions de carbone attribuables à l'activité humaine, ce qui est peu comparé au reste mais non négligeable. Il devient donc primordial de trouver des solutions efficaces pour réduire ces émissions.

L'objectif de ces accords internationaux est la lutte contre le réchauffement climatique de la planète et ses répercussions sur la santé et l'environnement. Le développement de nouveaux types de carburants (carburants de synthèses et carburants issus de la biomasse) est primordial afin de lutter contre les émissions de gaz à effet de serre provenant des transports.

Le prix élevé du carburéacteur contribue aussi à réduire l'écart par rapport au coût actuel des biocarburants. Plus de 1500 vols de passagers ont déjà été effectués pour démontrer la viabilité des biocarburants. Ces carburants peuvent réduire de 80 % les émissions de CO_2 durant leur cycle de vie par rapport aux carburants dérivés du pétrole ; leur adoption représenterait une avancée majeure (Figure I.9).

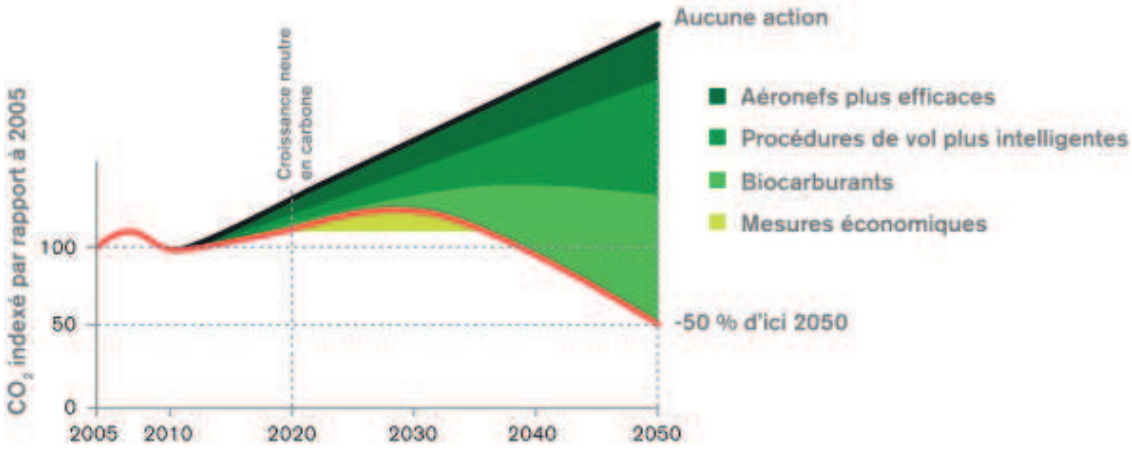


Figure I.9 : Prévision de la baisse des émissions de CO_2 [4]

1.1.3 Transport aérien et pollution atmosphérique

L'aviation a deux talons d'Achille : la pollution sonore et la pollution atmosphérique. En dépit des progrès énormes accomplis pour réduire ces nuisances majeures, les perspectives d'expansion soutenues du transport aérien mondial posent désormais un défi de taille à l'ensemble de la recherche aéronautique sur le terrain de l'environnement. En effet, les transports étant les premiers responsables des émissions de gaz à effet de serre dans l'atmosphère, ils participent aussi aux émissions polluantes à l'origine de la pollution de l'air ambiant. Ces polluants ont un impact néfaste sur l'environnement et sur la santé.

L'explosion du trafic aérien ces dernières années et les estimations de la croissance de ce type de transport impliquent une limitation des rejets de polluants dans l'air par les compagnies aériennes. Cependant, même si des progrès sans cesse plus importants sont accomplis pour restreindre les émissions, l'impact de l'aviation sur l'environnement est préoccupant car il se produit dans une partie particulièrement sensible de l'écosystème terrestre.

1.1.3.1 *Les polluants liés au transport aérien*

Les principaux polluants générés par l'aviation, en dehors du dioxyde de carbone, ayant un effet avéré sur la santé et l'environnement, sont des rejets de polluants primaires tels que :

- le monoxyde de carbone (CO) qui résulte de la combustion incomplète, notamment pendant le roulage.
- les oxydes d'azote NO_x ($NO+NO_2$), émis lors de la combustion.
- les particules fines (PM_{10}, 10 microns et $PM_{2,5}$, 2,5 microns)
- Les hydrocarbures HC imbrulés, ce qui inclut les composés organiques volatiles (COV), dont le buta-1,3-diène et le benzène, dangereux pour le fœtus et cancérogène.
- Le dioxyde de soufre SO_2.
- les HAP (Hydrocarbures aromatiques polycycliques).

Les oxydes d'azote issus des aéronefs sont les deuxièmes polluants majoritaires. Le monoxyde d'azote NO est formé à haute température et à haute pression, principalement à partir de l'azote de l'air, selon le mécanisme du NO thermique proposé par Zeldovich [15] :

$$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$$

$$N + O_2 \rightleftharpoons NO + O$$

$$N + OH \rightleftharpoons NO + H$$

Celui-ci a été complété par le mécanisme du NO précoce de Fenimore [16]:

$$CH + N_2 \rightleftarrows HCN + N$$

Or, on considère maintenant plutôt la formation initiale de NCN suivant la réaction :

$$CH + N_2 \rightleftarrows NCN + H$$

L'oxydation de NCN forme ensuite NO :

$$NCN+O \rightleftarrows CN+NO$$

$$NCN+OH \rightleftarrows HCN+NO$$

$$NCN+H \rightleftarrows HCN+N$$

$$NCN+O_2 \rightleftarrows NO+NCO$$

$$NCN+O_2 \rightleftarrows NO+CNO$$

Pendant la phase de décollage et de montée de l'aéronef, les moteurs sont poussés au maximum et les hautes températures engendrées par ces phases contribuent fortement à la formation des NO_x. Ces émissions d'oxydes d'azotes sont très néfastes pour l'environnement et la santé notamment car ce sont des gaz irritant pour les voies respiratoires. Le monoxyde d'azote NO est un précurseur de l'ozone troposphérique (Figure I.10) [17] qui a un impact néfaste sur la santé humaine, les tissus animaux et végétaux. De plus, l'acétaldéhyde (CH_3CHO) qui est un polluant toxique de l'air formera du Nitrate de Peroxyacétyle (PAN) par un processus d'oxydation puis d'addition avec les oxydes d'azote. C'est un polluant secondaire nuisible pour les végétaux. La photodissociation du PAN reformera par la suite du dioxyde d'azote NO_2. Cette espèce peut donc, après dispersion atmosphérique, former des oxydes d'azotes par réaction chimique dans des zones du globe sans activité humaine. Ce Nitrate de Peroxyacétyle contribue de plus à la formation de l'ozone troposphérique. Ainsi, la présence des oxydes d'azote dans la haute troposphère (HT) et la basse stratosphère (BS) est due aux émissions des moteurs d'avion qui contribuent de cette façon à la formation ou à la destruction d'ozone dans les couches de la haute atmosphère.

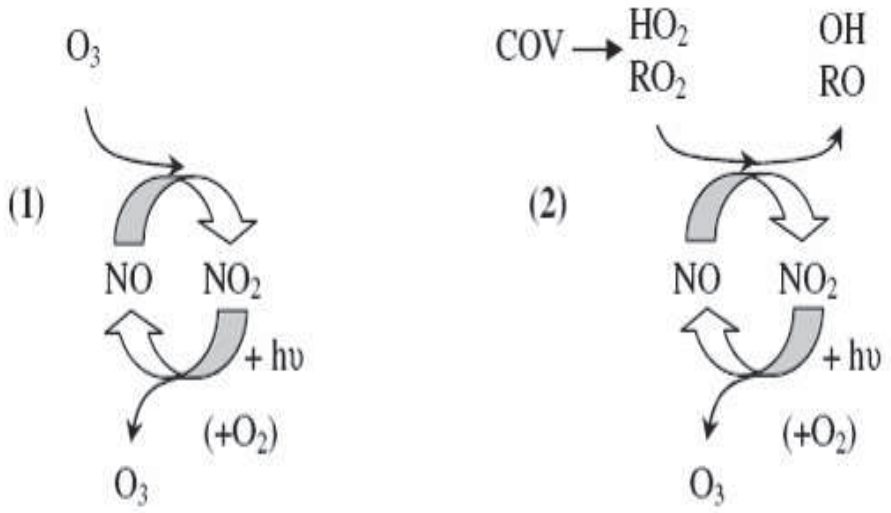


Figure I.10 : Cycle de l'ozone troposphérique en milieu pollué (1) et non pollué (2) (en présence de COV, d'oxydes d'azote et de lumière) [17]

Le monoxyde de carbone (CO) est l'un des autres principaux polluants émis par les moteurs d'avion. Celui-ci est émis lorsque le moteur tourne au ralenti, comme lors des déplacements de l'avion au sol. Ces émissions sont dues essentiellement à une combustion se

déroulant globalement ou localement dans un milieu riche. Elles proviennent de la combustion incomplète du kérosène. Or, c'est un gaz très toxique pour la santé de l'homme car il est considéré comme un poison pour l'hémoglobine. En effet, celui-ci se fixe à la place de l'oxygène sur l'hémoglobine du sang, ce qui entraîne un manque d'oxygénation des vaisseaux sanguins, du cœur et du système nerveux.

Les hydrocarbures imbrûlés (HC) sont quand à eux formés lors de la combustion incomplète du kérosène en milieu riche et/ou à faible température, notamment lorsque le moteur tourne au ralenti comme pendant le stationnement ou le roulage au sol. Il s'agit de l'ensemble des produits hydrocarbonés retrouvés dans les gaz d'échappement et constitués à la fois des composants du carburant lui-même, non transformés lors du processus de combustion, et de produits obtenus par diverses réactions complexes entre hydrocarbures (craquage, cyclisations, hydrogénations, déshydrogénations…). Les Composés Organiques Volatils (COV), qui font partie de cette catégorie, participent au forçage radiatif via la formation d'ozone troposphérique. Certain de ces composés, comme le benzène, présentent de plus un effet cancérogène. Ils participent aussi aux réactions chimiques dans la haute atmosphère. On distingue par ailleurs le méthane (CH_4), qui est un GES, et dont le pouvoir de réchauffement global est 25 fois supérieur au CO_2 [8].

Parmi les produits organiques (aldéhydes, cétones, phénols, alcools, acides…) susceptibles d'accompagner les HC dans les gaz d'échappement des moteurs, les aldéhydes et le buta-1,3-diène sont les plus abondants et probablement les plus gênants. Aux Etats-Unis, il a été décidé, à partir de 1992, de regrouper sous l'appellation TAP (Toxic Air Pollutants), cinq polluants spécifiques, considérés comme nocifs et justifiant, à ce titre, une vigilance particulière. Ce sont le benzène, le buta-1,3-diène, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde et les HAP. Les TAP ne représentent qu'une faible fraction (environ 8 %) de la totalité des HC gazeux dans l'air.

La présence de zones localement riches dans la chambre de combustion entraîne la formation d'espèces poly-aromatiques de plus en plus volumineuses par oxydation partielle du kérosène à haute température. Suite à une étape de nucléation, ces espèces vont quitter la phase gazeuse pour former des particules solides qui vont coaguler entre elles et former des suies. Des espèces gazeuses vont alors se condenser à la surface de ces suies et participer à la croissance des particules. Celles-ci sont fortement émises lors des phases de décollage et de

montée de l'avion. Ces particules sont très toxiques pour l'homme car elles sont responsables de certaines pathologies comme les maladies cardio-vasculaires, les allergies respiratoires et le cancer broncho-pulmonaire. Elles sont responsables des réactions hétérogènes contribuant à détruire l'ozone et participent ainsi au forçage radiatif.

Enfin, les émissions de dioxyde de soufre (SO_2) résultent de l'oxydation du soufre contenu dans le kérosène lors de la combustion (de moins en moins présent). Ces émissions ont un impact sur la santé humaine, mais aussi sur l'acidification de l'atmosphère et sur la formation d'aérosols à partir de sulfates et d'acide sulfurique qui contribue aux pluies acides.

1.1.3.2 *Les réglementations*

L'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI) est une organisation qui fut crée en 1944. Celle-ci se consacre exclusivement aux problèmes liés à l'environnement du secteur aérien. En 1971, l'assemblée de l'OACI a mis en place des mesures visant à réduire les émissions de certains types d'aéronefs afin de limiter l'impact de l'aviation sur la pollution atmosphérique. Le Comité sur les émissions des moteurs d'avions (CAEE) fut crée en 1977 dans le but de mettre en place des normes sur les émissions des moteurs d'avion. Un Comité sur la protection de l'environnement en aviation (CAEP) a ensuite été créé en 1983 pour remplacer le CAEE et le CAN (Comité sur le bruit des aéronefs). Ces normes ont évoluées et se sont renforcées pour chaque nouvelle génération d'avion. Elles permettent de fixer une limite d'émission de certains polluants de l'air tels que les NO_x, le CO et les hydrocarbures imbrûlés, pour un cycle d'atterrissage et de décollage (LTO : Landing-Take Off). Ce cycle prend en compte les émissions locales dues au trafic aérien au sol et jusqu'à une altitude de 915 mètres. D'autre part, ces normes tendent aussi à limiter les émissions des moteurs d'aéronef en altitude.

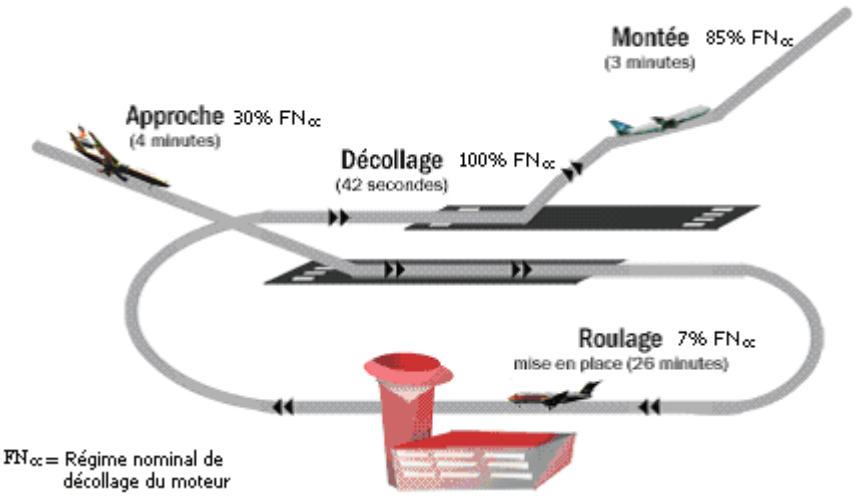


Figure I.11 : Cycle LTO utilisé par L'OACI pour certifier l'efficacité des moteurs d'avion [18]

Le cycle LTO est composé de quatre phases (Figure I.11) :

- 4 minutes d'approche (descente)
- 26 minutes de circulation au sol, roulage à l'arrivée et au départ (vers et depuis l'aérogare)
- 42 secondes lors de la phase de décollage
- 3 minutes de montée

Le cycle LTO est un cycle théorique d'atterrissage et de décollage défini par l'OACI qui va permettre une quantification des émissions de polluants issus du trafic aérien à basse altitude. La figure I.12 présente les émissions en oxydes d'azote et en particules fines d'un aéronef à l'aéroport de Roissy Charles De Gaulle lors d'un cycle LTO. La phase la plus émettrice de pollution est la montée qui représente la moitié des rejets d'oxydes d'azote et le tiers des particules. Elle est suivie par le décollage qui émet un quart des oxydes d'azotes et près de 15% des particules. La part que représente le roulage dépend essentiellement de la taille de l'aéroport.

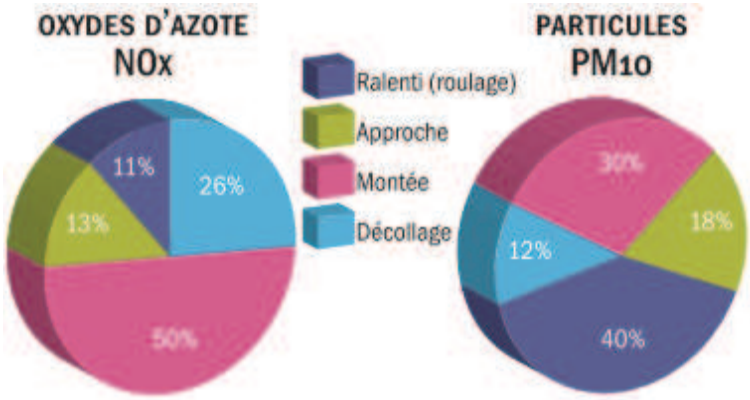


Figure I.12 : Rejets émis lors d'un cycle LTO d'oxydes d'azote et de particules à Paris (Roissy Charles de Gaulle) [19]

Selon le Conseil international de coordination des associations des industries aérospatiales (ICCAIA), les progrès technologiques et les réglementations de plus en plus sévères ont permis de diminuer les émissions de CO, de NO_x, de fumées et d'hydrocarbures imbrûlés. La quantité de soufre dans le kérosène est de plus en plus faible d'où une diminution des émissions de SO_2. D'ici 2020, les constructeurs d'avions envisagent de réduire d'avantage les émissions de composés polluants issus du secteur aérien. Le groupe européen ACARE a d'autres objectifs tels que la réduction de moitié de la consommation du kérosène et de 80% des émissions d'oxydes d'azote d'ici 2020.

1.2 Les carburants reformulés

Tout comme le transport routier, le transport aérien s'est engagé dans une démarche volontariste de réduction de ses niveaux d'émissions de gaz à effet de serre, ainsi que de réduction de la dépendance au pétrole. Parmi toutes les solutions étudiées, les carburants alternatifs (ou biojet) occupent une place à part entière. En effet, pour des raisons énergétiques et environnementales les activités de recherche sur la reformulation des carburants ont considérablement augmenté au cours de ces dernières années. Cette démarche est tout à fait comparable au développement des biocarburants dans le transport routier, avec potentiellement les mêmes avantages (émissions biogéniques de CO_2 comptabilisées à zéro) et les mêmes inconvénients (surcoût de production, production potentielle "limitée" et bilan GES sujet à discussion selon les filières). Toutefois, les contraintes liées aux modes

d'utilisation des aéronefs ne rendent pas toutes les filières alternatives possibles et une analyse précise des possibilités doit être réalisée pour identifier les solutions à privilégier.

Dans ces conditions, les filières le plus souvent envisagées pour fournir du biojet, et dont la certification a été obtenue ou est en cours d'étude au sein de l'American Society for Testing and Materials (ASTM), sont les suivantes [20]:

- Huiles végétales hydro traitées (colza, soja, palme, usagées, etc.) : cette filière (HEFA pour Hydrotreated Esters and Fatty Acids) est certifiée en mélange à 50 % par l'ASTM depuis 2011.
- Jet Fischer-Tropsch (F-T) à partir de biomasse ligno-cellulosique (BtL) : filière déjà homologuée (en mélange à 50 % par l'ASTM) dans le cadre de la certification globale des jets issus des filières F-T, quelle que soit l'origine de la charge (gaz naturel, charbon, etc.), obtenue en 2009.
- Farnésane : Cette molécule a été développée par Amyris et Total pour être incorporée au Jet A-1. Elle provient d'un procédé appelé « Direct Sugar to Hydro Carbon » (DSHC). Ce procédé utilise des saccharides provenant de différentes matières premières, qui par fermentation avec des levures, créées directement des hydrocarbures. Cette filière a été certifiée en juin 2014 pour des mélanges contenant jusqu'à 10% de farnésane [21, 22].
- Autres procédés tels que la pyrolyse de déchets/résidus ou les filières plus biotechnologiques à partir de sucre (en phase de R&D).

Des sociétés françaises telles que l'IFPEN (IFP Energies Nouvelles), notamment avec la filiale Axcens, sont engagées dans la recherche de nouvelles énergies et plus particulièrement dans la diversification des sources de carburants.

En septembre 2008, un groupe internationale nommé Sustainable Aviation Fuel Users Group a été créé dans le but de développer et d'accélérer l'utilisation des carburants alternatifs destinés aux aéronefs. On y trouve plusieurs compagnies aériennes telles que Air France, Air New Zealand, Japan Airlines ou encore British Airways.

1.2.1 Les carburants de synthèse - La synthèse Fischer-Tropsch

L'invention du procédé Fischer-Tropsch remonte à 1923, date qui correspond au premier brevet déposé par deux chimistes allemand, Hans Fischer et Franz Tropsch travaillant pour le Kaiser Wilhelm Institut (Allemagne) à l'époque dédié à la valorisation du charbon. Ce procédé repose sur un ensemble de réactions chimiques catalysées permettant, à partir de gaz de synthèse aussi appelé syngas, composés de monoxyde carbone et d'hydrogène, d'obtenir une large gamme de molécules hydrocarbonées (paraffines, oléfines, dérivés oxygénés…). Ce gaz de synthèse peux provenir de charbon, de gaz naturel, ou plus récemment de biomasse. Le mélange d'hydrocarbures formé est ensuite hydro craqué (hydro-isomérisé) pour fournir du carburant liquide synthétique (synfuel).

Le procédé en lui même apparaît comme assez similaire à une forme de polymérisation. Selon les conditions retenues, la gamme des produits obtenus va grandement varier. Ce sont les choix de catalyseurs, réacteurs et fenêtres opératoires qui déterminent l'orientation de la production ainsi que ses performances. En contrôlant ces paramètres, il est donc possible de fabriquer divers intermédiaires chimiques et pétrochimiques ainsi que des carburants synthétiques. Cependant la synthèse reste, même après une sélection poussée de ces facteurs, assez peu sélective puisqu'il en résulte par exemple une production de carburants couvrant aussi bien les fractions essences, diesel et kérosène que les cires.

Le monoxyde de carbone et l'hydrogène vont tout d'abord réagir selon la réaction suivante :

$$2H_2 + CO \rightleftharpoons -CH_2- + H_2O \quad \Delta H298°K = -165\ KJ.mole^{-1}$$

Cette réaction forme des radicaux alkyles qui vont par la suite réagir avec un catalyseur à base de fer ou à base de cobalt pour produire respectivement des oléfines (utilisées pour produire des détergents synthétiques) ou des paraffines linéaires saturées allant de C_2H_6 au $C_{80}H_{162}$. Les chaînes d'hydrocarbures de type paraffinique supérieures à C_{20} obtenues sous la forme de cires solides sont transformées en carburant de synthèse via des procédés d'hydro-isomérisation et d'hydrocraquage.

$$n(2H_2 + CO) \rightleftharpoons C_nH_{2n} + nH_2O \text{ (catalyseur à base de fer)}$$

$$(2n+1)H_2 + nCO \rightleftharpoons C_nH_{2n+2} + nH_2O \text{ (catalyseur à base de cobalt)}$$

Les carburants ainsi formés sont donc sous forme liquide et possèdent des caractéristiques chimiques et physiques propres. En effet, des analyses ont montrées qu'ils ne contiennent quasiment pas de métaux, azote, soufre ou aromatiques [23, 24]. La coupe kérosène provenant de ces carburants est appelée kérosène synthétique paraffinique (SPK : Synthetic Paraffinic Kerosene). Celui-ci possède un rapport hydrogène/carbone (H/C ratio) plus élevé que le carburéacteur standard Jet A-1 (1,91 pour le Jet A-1 contre 2,12 pour le SPK). La composition chimique de ces kérosènes de synthèse entraîne ainsi une diminution des rejets de CO_2 [11] et une hausse des émissions de vapeur d'eau. Il en résulte une diminution des GES dans les basses altitudes, H_2O ne présentant pas de danger dans les basses altitudes [25]. En revanche, dans les hautes altitudes les phénomènes sont plus complexes et difficiles à déterminer. La faible teneur en hydrocarbures insaturés et en aromatiques de ces kérosènes synthétiques entraîne une diminution des émissions de particules fines et de suies, ainsi que d'hydrocarbures imbrûlés [26, 27]. Les carburants de synthèse ainsi formés sont de meilleure qualité (pas d'aromatique, d'azote ni de soufre) que les carburants classiques, d'où une réduction des émissions polluantes. Ces carburants de synthèse peuvent donc représenter une bonne alternative aux carburants conventionnels actuels.

On considère trois principaux carburants de synthèse, dépendant de l'origine du gaz de synthèse, formés à partir de la synthèse F-T : le CtL (Coal-to-Liquid) qui est obtenu à partir de charbon, Le GtL (Gaz-to-Liquid) qui provient de gaz naturel et enfin le BtL (Biomass-to-Liquid) formé à partir de biomasse. Plus récemment, un quatrième type de carburant de synthèse F-T est apparu appelé StL (Solar-to-Liquid). Ce dernier est formé à partir de dioxyde de carbone, d'eau et d'énergie solaire concentrée [28].

En 1999, la société Sud-Africaine Sasol a obtenu l'approbation d'un carburéacteur semi-synthétique pour l'aviation civile de façon à augmenter sa production, ainsi que pour faire face à la demande croissante de carburant utilisé à l'aéroport international de Johannesburg. Ce carburant de synthèse est un CtL, donc produit à partir du charbon par des procédés de synthèse F-T. Celui-ci est constitué en grande partie d'iso-paraffines [29, 30]. Toutefois, Sasol a proposé la fabrication d'un kérosène entièrement synthétique contenant des

aromatiques pour pouvoir répondre aux exigences internationales pour un carburéacteur classique.

Le mode de production utilisé par la société Sud-Africaine Sasol pour obtenir un kérosène synthétique par un procédé de synthèse F-T à partir du charbon (CtL) est illustré sur la figure I.13.

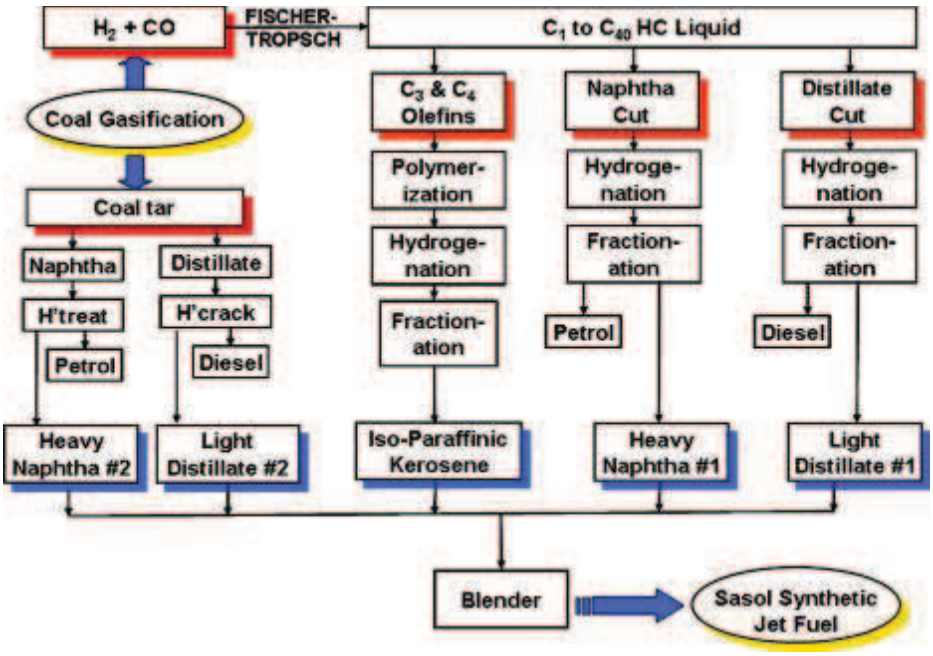


Figure I.13 : Mode de production d'un kérosène synthétique (Sasol) [29]

D'autres sociétés de raffinage ont déjà développé ou sont en voie de développer des usines de production de carburants synthétiques par des procédés F-T à partir de gaz naturel ou de biomasse.

1.2.2 Composition chimique

La synthèse Fischer-Tropsch produit ainsi un carburant liquide composé exclusivement de paraffines linéaires. Cependant, pour être utilisé en tant que carburéacteur, ces hydrocarbures doivent passer par des unités d'isomérisation, cyclisation et autre traitement de façon à satisfaire les exigences actuelles. Ainsi, la composition des carburants

synthétiques formés ainsi que leurs caractéristiques dépendent des procédés de fabrication utilisés.

Le tableau I.3 présente la composition et les caractéristiques physico-chimiques de trois kérosènes synthétiques produits par la synthèse F-T. On peut voir que ces carburéacteur de synthèse sont principalement composés de paraffines ramifiées (iso-paraffines), de paraffines linéaires (n-paraffines), de paraffines cycliques (naphtènes) et d'une faible fraction d'aromatiques [31, 32, 33]. Ils contiennent de fortes proportions en iso-paraffines qui ont comme particularité d'être peu ramifiées (une à deux ramification) [34, 35].

De plus, de façon à éviter les effets néfastes sur les performances des moteurs, les propriétés physico-chimiques de ces kérosènes synthétiques doivent être proches de celles des carburéacteurs conventionnels : indice de cétane, point d'ébullition, pouvoir calorifique, densité et rapport H/C.

Tableau I.3 : Composition et caractéristiques de trois kérosènes synthétiques [31, 32, 33]

Type	Composition chimique (% massique)	Caractéristiques
SPK (IFP)	iso-paraffines : 79,88 % n-paraffines : 19,63 % aromatiques : 0,49 %	Formule brute : $C_{11,5}H_{24,41}$ Ratio H/C : 2,12 Indice de cétane : 45,45
GtL (Shell)	n-paraffines : 28,1 % iso-paraffines : 62,8 % di-naphtènes : 8,2 % mono naphtènes : 0,6 % aromatiques : 0,2 %	Formule brute : $C_{10,45}H_{23,06}$ Ratio H/C : 2,20 Indice de cétane : 57,94
CtL (Sasol)	n-paraffines : 5,7 % iso-paraffines : 36,3 % di-naphtènes : 28,3 % mono naphtènes : 16,1 % mono aromatiques : 4 % naphténo-aromatiques : 9,6 %	Formule brute : $C_{11,06}H_{21,6}$ Ratio H/C : 1,95 Indice de cétane : 32,7

1.2.3 Les biocarburants

Le terme «biocarburant» peut englober tout combustible liquide ou gazeux provenant d'une source de biomasse, donc renouvelable. La production de biocarburants implique la

conversion d'une quantité de biomasse, qui peut être une culture, des résidus agricoles ou forestiers, ou d'autres sous-produits voire même de déchets. On utilise un processus de conversion, qui peut être de nature biologique, thermique, chimique, ou une combinaison de ceux-ci, dans le but de former un ou plusieurs produits. Cependant, les types de biocarburants les plus communément utilisés dans les transports routiers d'aujourd'hui ne sont pas adaptés pour une utilisation dans le secteur aéronautique.

Les compagnies aériennes n'envisagent pas les carburants qui ne sont pas désignés comme «drop-in » pour remplacer le Jet A-1 conventionnel. Un carburant que l'on désigne par «drop-in » est défini comme un produit qui satisfait toutes les exigences et caractéristiques du carburant actuel et ne nécessitant aucune modification de l'équipement ou des infrastructures. Les spécifications du carburant Jet sont définies en termes de performances requises pour le combustible, comprenant les caractéristiques telles que la teneur en énergie, le « freeze point », et la stabilité thermique.

Les carburants destinés à l'aviation dérivés de la biomasse pourraient être une solution au remplacement du kérosène classique, avec une certification des résultats à 50% de substitution et la perspective d'atteindre 100% de biocarburant dans le futur. Les biocarburants pourraient ainsi remplacer entre 35% et 100% de la demande totale en kérosène d'ici 2050, avec une forte probabilité de diminution des gaz à effet de serre, à condition que le risque induit par le changement d'utilisation des terres pour la production de matières premières soit géré de façon efficace. En effet, Les ressources nécessaires pour pouvoir subvenir aux besoins d'une aviation où l'on utiliserait des réservoirs remplis à 50/50 de bio-kérosène et de kérosène traditionnel, atteindraient 6% de l'espace cultivable totale mondial [11]. Si suffisamment de ces matières premières peuvent être cultivées, cela pourrait engendrer une diminution de l'ordre de 30% des émissions de CO_2, soit 0,78% des émissions totales en CO_2. D'ici 2020, on prévoit que les biocarburants pourraient représenter 1,6% du mélange dans le carburant si les usines de production et les nouveaux types de cultures font leurs preuves et sont déployés rapidement.

Les biocarburants provenant d'huiles végétales peuvent être considérés comme durables, seulement si des quantités suffisantes de matières végétales peuvent être cultivées. Les biocarburants peuvent être mélangés en petites quantités au kérosène conventionnel (5-20%), ce sont alors des additifs permettant d'obtenir un carburant plus « propre », sans

changer les caractéristiques de celui-ci. C'est déjà le cas avec le biodiesel par exemple, pour lequel on ajoute des esters mono-alkylés provenant de la transestérification de matières premières lipidiques renouvelables (acides gras).

Les huiles végétales et d'algues peuvent être convertis en un carburant d'aviation généralement appelé carburant renouvelable hydro traité, bien que parfois aussi appelé bio-SPK (kérosène paraffinique synthétique). La première étape de cette voie implique la production d'huiles végétales à partir de cultures (culture, séchage et stockage, extraction de l'huile) ou la collecte des huiles de cuisson usagées, suivi par le transport de ces huiles à l'installation d'hydrotraitement. À l'usine, les impuretés sont éliminées des huiles (dégommage), qui sont ensuite chauffées et hydro traitées (traitement à l'hydrogène). Tout comme avec le processus F-T, le carburant produit ne contient pas de composés aromatiques ou de naphtènes. Ainsi, l'isomérisation de celui-ci doit être suffisante pour s'assurer que la contrainte liée au point de congélation soit bien atteinte.

La famille des alcools est une autre possibilité envisageable pour le remplacement des carburants provenant de ressources fossiles, ou même en tant qu'additifs. Cependant, bien que l'éthanol possède l'avantage de pouvoir être produit en grande quantité au niveau mondial par des procédés de première ou de seconde génération, il n'est pas adapté pour une utilisation dans les aéronefs moyen et long courriers, en raison notamment de son point éclair et de son contenu énergétique. Des voies de recherche sont cependant envisagées pour étudier le potentiel d'alcools à plus longue chaîne pouvant être ramifiés afin d'optimiser le compromis tenue au froid/point éclair/contenu énergétique.

1.3 Objectifs

Dans le cadre de cette étude, nous nous sommes intéressés à la solution « carburants de synthèse » qui offrent des perspectives encourageantes pour le futur. Des études cinétiques d'oxydation ont été menées en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) à l'Institut de Combustion Aérothermique Réactivité et Environnement sur le campus du CNRS d'Orléans. Ces études ont été menées dans un premier temps sur des hydrocarbures purs qui pourraient

être de bons candidats comme molécules-modèles pour représenter la part des iso-paraffines dans un kérosène de synthèse. Ces molécules sont des isomères de l'iso-octane utilisé comme tel jusqu'à maintenant. Dans un second temps, des études ont été menées sur trois kérosènes de synthèse dont un SPK fournit par l'IFP, un CtL (Sasol) et un GtL (Shell).

L'objectif de ce travail est la compréhension du déroulement de la combustion des carburants de synthèse destinés au secteur aérien.

1.4 Conclusion

L'aviation est un moyen de transport rapide et très pratique mais cependant très énergivore. C'est pour cela que le transport aérien est devenu une source majeure de pollution de nos jours. Avec la diminution des ressources pétrolières dont dépendent les pays industrialisé ainsi que les contraintes environnementales telles que le réchauffement de la planète et la pollution atmosphérique liées à l'utilisation de carburants fossiles, le secteur des transports est poussé à économiser le pétrole et à réduire ses émissions de gaz à effet de serre et de polluants de l'air.

Au cours de ces dernières années l'essor du trafic aérien a poussé au développement de carburants alternatifs pouvant être adaptés au transport aérien. De ce fait, les carburants reformulés tels que les biocarburants et les carburants de synthèse font l'objet d'importantes recherches (caractéristiques physico-chimiques, impact sur les émissions polluantes, etc.) et de développements. Cependant cela reste un sujet relativement récent et encore peu d'études ont été réalisées dans ce domaine, particulièrement en cinétique de combustion.

Références bibliographiques

[1] Union Française des Industrie Pétrolière (UIFP), http://www.ufip.fr

[2] U.S. Energy Information Administration, *International Energy Outlook 2013*

[3] D. Ballerini

Le plein de biocarburant ?, 2007, TECHNIP, Paris.

[4] International Air Transport Association (IATA), http://www.iata.org

[5] D. Krajka

Le kérosène secoué, http://www.indices.usinenouvelle.com/

[6] Chevron Global Aviation,

Aviation Fuels Technical Review, 2006

[7] CEA – Aquaportail, http://www.aquaportail.com

[8] Intergovernmental Panel on Climate Change, 2007, http://www.ipcc.ch

[9] R. Philipona, B. Dürr, A. Ohmura and C. Ruckstuhl

Anthropogenic greenhouse forcing and strong water feedback increase temperature in Europe, Geophysical Research Letters, 2005, vol. 32

[10] CITEPA

Inventaire des émissions de polluants atmosphériques et de gaz atmosphérique en France - séries sectorielles et analyses étendues, Format SECTEN, 2013, http://www.citepa.org/publications/inventaires.htm

[11] L. Rye, S. Blakey and C. W. Wilson

Sustainability of supply or the planet: a review of potential drop-in alternative aviation fuels, Energy & Environmental Science, 2010, vol. 3, pp. 17-27

[12] J. Rosenfeld, J. Remes, L. Mendonca, W. Hu, S. Palani, U. Sethi, S. Nyquist, I. Bozon, O. Roelofsen, P. Haas, K. Vermeltfoort and G. Terzian

Averting the next energy crisis: The demand challenge, McKinsey Global Institute, 2009

[13] Jean-Marc Barnola

Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement,Grenoble
http://www.lgge.osug.fr

[14] Paul Kuentzman

Les défis du transport aérien, ONERA, conférence UPMC 23 novembre 2010

[15] J. Zeldovich

The oxidation of nitrogen in combustion and explosions, Acta Physicochimica URSS, 1946, vol. 21, pp. 577-628

[16] C. P. Fennimore

Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbons flames, Proceedings of the Combustion Institute, 1971, vol. 13, pp. 373-380

[17] K. Miet

Etude expérimentale de la dégradation hétérogène des Composés Aromatiques Polycycliques (CAP) d'intérêt troposphérique, Thèse, Université de Bordeaux, 2008

[18] International Civil Aviation Organisation (ICAO), http://www.icao.fr

[19] AIRPARIF, www.airparif.asso.fr

La qualité de l'air autour des plates-formes aéroportuaires de ROISSY-CHARLES DE GAULLE ET DU BOURGET, Actualité, n° 21, février 2004,

[20] Simon Vinot et Paula Coussy

Le transport aérien et la problématique du CO_2 : enjeux des mécanismes ETS et des biojets, Panorama, 2013, http://www.ifp.fr

[21] Amyris

Total and Amyris renewable jet fuel ready for use in commercial aviation, Juin 2014 http://www.amyris.com/News/398/Total-and-Amyris-Renewable-Jet-Fuel-Ready-for-Use-in-Commercial-Aviation

[22] Aviation Initiative for Renewable Energy in Germany (Aireg)

Total : Milestone for sustainable aviation: innovative fuel gains approval, Juin 2014 http://www.aireg.de/en/press-releases/333-milestone-for-sustainable-aviation-innovative-fuel-gains-approval.html

[23] K. Kohse-Höinghaus, P. Osswald, T. A. Cool, T. Kasper, N. Hansen, F. Qi, C. K.Westbrook and P. R. Westmoreland

Biofuel Combustion Chemistry: From Ethanol to Biodiesel, Angewandte Chemie International Edition, May 2010, vol. 49, pp. 3572-3597

[24] D. Ballerini et N. Alazard-Toux

Les biocarburants : État des lieux, perspectives et enjeux du développement, Editions TECHIP, 2006

[25] M. Nehse, J. Warnatz and C. Chevalier

Kinetic Modeling of the Oxidation of Large Aliphatic Hydrocarbons, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, vol.26, pp. 773-780

[26] E. Corporan, M. J. Dewitt, V. Belovich, R. Pawlik, A. C. Lynch, J. R. Gord, T. R. Meyer

Emission Characteristics of a Turbine Engine and Research Combustor Burning a Fischer-Tropsch Jet Fuel, Energy & Fuels, 2007, vol. 21, pp. 2615-2626

[27] M. S. P. Kahandalawa, M. J. Dewitt, E. Corporan and S. S. Sidhu

Ignition and Emission Characteristics of Surrogate and Practical Jet Fuels, Energy & Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3673-3679

[28] SOLAR-JET Zero-carbon jet fuel from sunlight, http://www.solar-jet.aero

[29] C. A. Moses and P. N. J. Roets

Properties, Characteristics, and Combustion Performance of Sasol Fully Synthetic Jet Fuel, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2009, vol. 131, 041502

[30] C. A. Moses and L. L. Stavinoha

Qualification of Sasol Semi-Synthetic Jet A-1 As Commercial Jet Fuel, Southwest Research Institute, 1997, Report No. 8531

[31] A. Mzé-Ahmed, P. Dagaut, K. Hadj-Ali, G. Dayma, T. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, C. Naumann, U Riedel

Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study, Energy & Fuels, 2012, vol. 26, pp. 6070–6079

[32] P. Dagaut, F. Karsenty, G. Dayma, P. Diévart, K. Hadj-Ali, A. Mzé-Ahmed, M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, T. Kathrotia, T. Kick, C. Naumann, U Riedel, L. Thomas

Experimental and Detailed Kinetic Model for the Oxidation of a Gas to Liquid (GtL) Jet Fuel, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 835-847

[33] A. Mzé-Ahmed, K. Hadj-Ali, P. Diévart, P. Dagaut

Kinetics of oxidation of a synthetic jet fuel in a jet-stirred reactor: experimental and modeling study, Energy & Fuels, 2010, vol. 24, pp. 4904-4911.

[34] B.L. Smith and T.J. Bruno

Improvements in the Measurement of Distillation Curves. 4. Application to the Aviation Turbine Fuel Jet-A, Industrial and Engineering Chemistry Research, 2007, vol. 46, pp. 310-320

[35] S.M. Sarathy, C. Yeung, C.K. Westbrook, W.J. Pitz, M. Mehl and M.J. Thomson

An experimental and kinetic modeling study of n-octane and 2-methylheptane in an opposed-flow diffusion flame, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 1277-1287

Chapitre II

Bibliographie

2 Étude bibliographique 47

2.1 Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures 47

2.1.1 Domaine de basse température 48

2.1.2 Coefficient négatif de température (CNT) 50

2.1.3 Domaine de haute température 52

2.2 État de l'art sur la cinétique d'oxydation de kérosènes reformulés 53

2.2.1 Etudes expérimentales 54

2.2.1.1 *Formation des suies* 54

2.2.1.2 *Détermination de délais d'auto-inflammation* 56

2.2.1.3 *Détermination de vitesse de flamme laminaire* 61

2.2.1.4 *Détermination de profils d'espèces* 64

2.2.1.5 *Récapitulatifs des données expérimentales* 68

2.2.2 Etudes des mécanismes cinétiques 69

2.3 Conclusion 76

Références bibliographiques 77

2 Étude bibliographique

Les premières études relatives à la cinétique de combustion d'hydrocarbures remontent au début du 20ème siècle. De nos jours, l'ensemble des catégories d'espèces chimiques ont été étudiées expérimentalement dans un large domaine de température et de pression, bien qu'il subsiste tout de même une grande disparité dans la répartition de ces études [1]. La famille des alcanes et plus particulièrement celle des alcanes linéaires a été le sujet de très nombreuses études. Leur mécanisme d'oxydation est donc désormais bien connu. Moins d'études concernent les alcanes ramifiés ou iso-alcanes qui sont un des constituants principaux des kérosènes de synthèse. Les études sur les naphtènes et les aromatiques sont de même moins nombreuses, notamment en ce qui concerne les di-naphtènes et les alkylbenzènes, présents dans certains kérosènes de synthèse.

Dans ce chapitre nous présenterons l'état de l'art sur l'oxydation des hydrocarbures. Puis nous exposerons les différents travaux publiés sur l'oxydation de kérosènes de synthèse utilisés dans le secteur aéronautique, aussi bien d'un point de vue expérimental que par modélisation.

2.1 Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures

Les hydrocarbures de type paraffinique sont divisés en deux groupes : les linéaires aussi appelés n-paraffines (ou n-alcanes) et les paraffines ramifiées que l'on appelle aussi iso-paraffines (ou iso-alcanes). Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, les paraffines (linéaires et ramifiées) sont un des constituants majoritaires des kérosènes de synthèse. Les caractéristiques principales de l'oxydation de ces hydrocarbures sont présentées dans cette partie.

Lors de l'oxydation d'un hydrocarbure on peut distinguer trois régimes en fonction de la température (Figure II.1). Le premier est dit de basse température et s'opère selon le processus de peroxydation-isomérisation. Le second régime survient pour des températures

plus élevées (supérieur à ~750 K) et ce sont des réactions de rupture de liaisons qui prédominent dans ce domaine [1]. Enfin, le dernier régime d'oxydation, appelé « coefficient négatif de température » (CNT), correspond à la zone intermédiaire située entre les domaines de basses et de hautes températures.

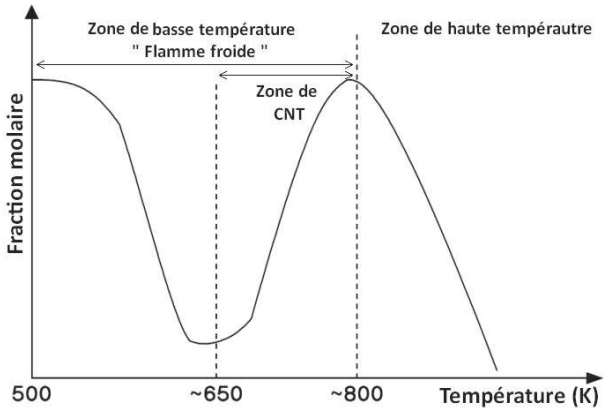


Figure II.1 : Oxydation d'un fuel en fonction de la température

2.1.1 Domaine de basse température

A basse température, le mécanisme d'oxydation est amorcé par l'arrachage d'un atome d'hydrogène sur l'hydrocarbure initial RH par une molécule d'oxygène présente dans le milieu réactionnel. Cette réaction d'oxydation forme un radical alkyle et un radical hydroperoxyle (HO_2) (1). Cette réaction devient très rapidement négligeable devant les réactions de métathèses, sur le réactif initial RH, qui font intervenir des petits radicaux (O, H, OH, HO_2, HCO, CH_3, etc.) (2). Ces réactions de métathèses produisent les radicaux alkyles primaires R. Les réactions majoritaires intervenant ensuite sont les réactions d'addition des radicaux alkyles R sur l'oxygène, appelées réactions de peroxydation, pour former les radicaux peroxyalkyles (ROO) (3).

$$RH + O_2 \rightleftharpoons R + HO_2 \quad (1)$$

$$RH + X \rightleftharpoons R + HX \quad (2)$$

$$R + O_2 \rightleftharpoons ROO \quad (3)$$

Après cette addition, ces radicaux ROO vont s'isomériser par transfert d'un atome d'hydrogène du groupement alkyle à l'atome d'oxygène qui porte un électron célibataire, via un état de transition cyclique, pour former les radicaux hydroperoxyalkyles QOOH (4). Cependant, ces radicaux ROO peuvent aussi former des radicaux alkoxy RO par une réaction de dismutation avec des radicaux R'OO selon la réaction (5). Les radicaux ROO peuvent enfin former des molécules hydroperoxyalkyles ROOH par arrachage d'un atome d'hydrogène sur une molécule hydrocarbonée R'H, par réaction avec le radical peroxyalkyle suivant la réaction (6). La molécule ROOH ainsi formé va ensuite se décomposer en radicaux alkoxy RO et hydroxyle OH (7).

$$ROO \rightleftharpoons QOOH \quad (4)$$

$$ROO + R'OO \rightleftharpoons RO + R'O + O_2 \quad (5)$$

$$ROO + R'H \rightleftharpoons R' + ROOH \quad (6)$$

$$ROOH \rightleftharpoons RO + OH \quad (7)$$

Les radicaux QOOH formés lors de la réaction (4) vont ensuite soit pouvoir se décomposer ou s'additionner une nouvelle fois sur l'oxygène. La décomposition de ces radicaux hydroperoxyalkyles va mener à la formation d'éthers cycliques, qui à leur tour vont subir des métathèses avec de petits radicaux (8). Les réactions d'addition des radicaux QOOH sur l'oxygène vont former des radicaux hydroperoxyalkyles peroxy OOQOOH, selon la réaction (9), qui à leur tour vont s'isomériser pour former des cétohydroperoxydes et des radicaux hydroxyles OH (réactions (10) et (11)). Ces cétohydroperoxydes étant instables au-delà de ~600 K, leur dégradation va rapidement se mettre en place pour former d'autres radicaux hydroxyles et de nouvelles espèces oxygénées qui vont se décomposer (12). La dégradation de ces espèces va donc mener à une production importante de radicaux hydroxyles. Ces radicaux vont ensuite aller réagir par métathèse avec le réactif de départ et ainsi entraîner une rapide augmentation de la réactivité. Ce phénomène est responsable de l'apparition de la flamme froide.

$$QOOH \rightleftharpoons \text{produits} + OH \quad (8)$$

$$QOOH + O_2 \rightleftharpoons OOQOOH \quad (9)$$

$$OOQOOH \rightleftharpoons HOOQ'OOH \quad (10)$$

$$HOOQ'OOH \rightleftharpoons OH + OQ'OOH \text{ (céto-hydroperoxyde)} \quad (11)$$

$$OQ'OOH \rightleftharpoons OH + OQ'O \quad (12)$$

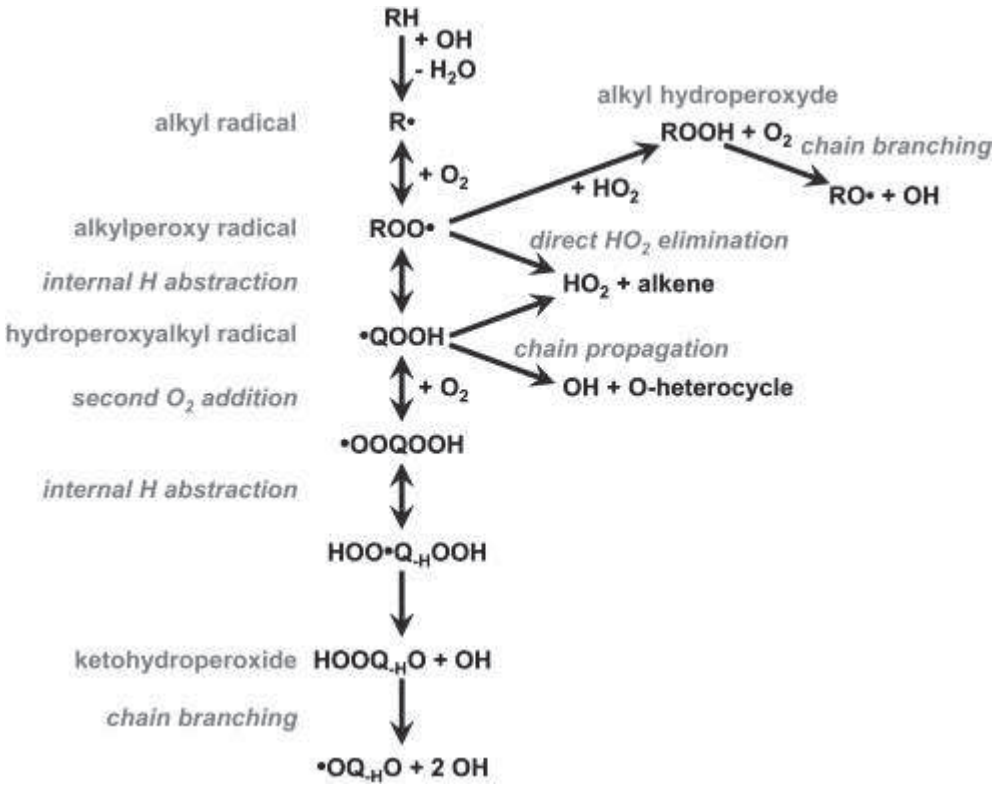


Figure II.2 : Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures à basse température [2]

Ce mécanisme d'oxydation complexe intervenant à basse température (Figure II.2) est responsable de l'apparition d'une « flamme froide » correspondant à une augmentation de la réactivité du milieu entre ~550 et 650 K. Cependant, au-delà de ~650 K, on observe une diminution de la réactivité jusqu'à atteindre une température d'environ 750 K. Cette zone de transition située entre les domaines de basse et de haute température est appelée zone de coefficient négatif de température (CNT).

2.1.2 Coefficient négatif de température (CNT)

La transition entre la cinétique d'oxydation de basse température et celle de haute température est appelée zone de coefficient négatif de température. Elle est caractérisée par une baisse de la réactivité globale alors que la température augmente.

Cette chute de réactivité s'explique de plusieurs manières : dans un premier temps l'augmentation de température provoque un déplacement de l'équilibre vers les réactifs des réactions de basse température (10), (9), (4) puis (3).

$$OOQOOH \rightleftharpoons HOOQ'OOH \quad (10)$$

$$QOOH + O_2 \rightleftharpoons OOQOOH \quad (9)$$

$$ROO \rightleftharpoons QOOH \quad (4)$$

$$R + O_2 \rightleftharpoons ROO \quad (3)$$

Ces déplacements d'équilibre entraînent une diminution de la production en radicaux hydroxyles (OH) et une augmentation de celle en radicaux alkyles R. Ces derniers ne pouvant plus se fixer sur l'oxygène, ils vont alors être oxydés en formant des radicaux hydroperoxyles (HO_2) et des oléfines de même taille de chaîne carbonée que l'hydrocarbure de départ (13).

$$R + O_2 \rightarrow \text{oléfine} + HO_2 \quad (13)$$

Ces radicaux HO_2 étant beaucoup moins réactif que les radicaux OH, cela entraîne une baisse de réactivité globale du système. Ils vont par la suite réagir par réaction de dismutation pour former du peroxyde d'hydrogène (H_2O_2), stable à cette température, ce qui entraîne ainsi une accumulation de celui-ci (14).

$$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + HO_2 \quad (14)$$

La décomposition du peroxyde d'hydrogène n'a lieu qu'à des températures plus élevées (>800K). Elle produira deux radicaux OH entraînant une augmentation brutale de la réactivité débutant le mécanisme de haute température.

2.1.3 Domaine de haute température

A haute température (>800 K), le peroxyde d'hydrogène formé précédemment va donc se décomposer selon la réaction (15). La production de ces deux radicaux OH par molécule d'H_2O_2 va brutalement accroître la réactivité du mélange

$$H_2O_2 + M \rightarrow 2OH + M \qquad (15)$$

A ces températures élevées, la décomposition par les réactions de β-scissions des radicaux alkyles devient plus rapide que l'addition d'oxygène moléculaire par la réaction (3). Celles-ci fractionnent les radicaux en position β du carbone radicalaire par rupture des liaisons C-C (ou C-H). Elles produisent ainsi des composés plus petits dont un alcène et un autre radical selon les réactions (16) et (17). Les radicaux formés peuvent ainsi être H, CH_3 ou R'. Dans le cas où le radical formé est R', donc ayant un nombre de carbone supérieur à 1, des β-scissions successives décomposent les radicaux obtenus en radicaux et alcènes plus petits. Les radicaux méthyles ainsi formés sont peu réactifs et vont être consommées par des réactions de terminaison (24). Les atomes d'hydrogènes H formés vont quant à eux réagir avec des molécules d'oxygène présentes dans le milieu pour produire des radicaux OH et O selon la réaction (18). Cette réaction de ramification est l'une des plus importantes du mécanisme dans la zone de haute température car elle est responsable de l'emballement du système.

Des réactions d'oxydation consomment les radicaux à haute température par arrachage d'un atome d'hydrogène en β du carbone radicalaire par des molécules d'oxygène (20). Ce type de réaction conduit à la formation de l'alcène conjugué et d'un radical HO_2.

Les alcènes formés par ces réactions vont se dégrader et/ou s'oxyder et mener à la formation de monoxyde de carbone CO. Celui-ci va par la suite s'oxyder en réagissant avec des radicaux hydroxyles pour former du dioxyde de carbone CO_2 (25).

Ce mécanisme d'oxydation de haute température peut être simplifié et résumé par les réactions suivantes :

$$R + M \rightarrow \text{Alcènes} + R' + M \qquad (16)$$

$$R' + M \rightarrow \text{Alcènes conjugués} + H + M \quad (17)$$

$$H + O_2 \rightarrow O + OH \quad (18)$$

$$H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M \quad (19)$$

$$R + O_2 \rightarrow \text{Alcènes conjugués} + HO_2 \quad (20)$$

$$HO_2 + RH \rightarrow H_2O_2 + R \quad (21)$$

$$H_2O_2 + M \rightarrow 2OH + M \quad (22)$$

$$RH + X \rightarrow R + HX \quad (23)$$

Avec X : H, OH, O, HO_2, CH_3, HCO, radicaux hydrocarbonés

$$CH_3 + R \rightarrow \text{produits de terminaison} \quad (24)$$

$$CO + OH \rightarrow CO_2 + H \quad (25)$$

A haute température, l'initiation de la combustion fait aussi intervenir la décomposition du carburant :

$$RH + M \rightarrow R + H + M \quad (26)$$

$$RH + M \rightarrow R' + R'' + M \quad (27)$$

Ce domaine de haute température se caractérise donc par une augmentation brutale et puissante de la réactivité, avec des vitesses d'oxydation beaucoup plus élevées que dans le domaine de basses températures.

2.2 État de l'art sur la cinétique d'oxydation de kérosènes reformulés

A ce jour, les études portant sur l'oxydation de kérosènes reformulés restent relativement peu nombreuses. Cependant, l'importance de plus en plus grande de trouver une alternative aux carburants fossiles a considérablement fait augmenter ces dernières années le nombre d'études sur les carburéacteurs de synthèse. En effet, l'épuisement des ressources pétrolières a engendré une croissance constante du nombre de ces études.

2.2.1 Etudes expérimentales

2.2.1.1 *Formation des suies*

Au cours de l'année 2007, Corporan *et al.* [3] ont mené une étude sur l'oxydation de trois différents carburants destinés au secteur aérien :
- le premier est un kérosène synthétique, aussi appelé synjet, provenant de gaz naturel converti grâce au procédé de synthèse Fischer-Tropsch (F-T). Ce carburéacteur est essentiellement composé d'iso-paraffines.
- le second kérosène est un kérosène conventionnel destiné à l'aviation militaire et portant la dénomination JP-8.
- le troisième et dernier carburant est un mélange du kérosène synthétique et du kérosène conventionnel militaire.

Le but de cette étude était de comparer les rejets de composés polluants de ces trois différents kérosènes. Pour cela, ils ont utilisé un turbomoteur T63 ainsi qu'une chambre de combustion. Ils ont pu mettre en évidence, grâce à leurs expériences, une réduction des émissions de particules jusqu'à 90% lors la combustion du kérosène de synthèse. Ils ont de même observés une baisse significative de la production de HAP, notamment causé par la très faible fraction d'aromatiques présents dans le kérosène de synthèse, ainsi que des composés soufrés grâce à l'absence de soufre.

Quelques années auparavant, un certain nombre d'études [4-7] avaient déjà été réalisées sur la comparaison des rejets de particules de suies entre plusieurs carburants conventionnels et synthétiques. Ces études avaient déjà mis en avant les avantages des carburants de synthèse provenant de la synthèse Fischer-Tropsch sur la diminution des émissions.

Saffaripour *et al.* [8] ont mené en 2011 une étude expérimentale sur la mesure de la quantité de particules de suies générée par une flamme de diffusion à co-courant de cinq kérosènes prévaporisés. Ces expériences ont été faites sur un brûleur, à pression atmosphérique, sur lequel une flamme de diffusion laminaire s'installe. Ce brûleur est précédé d'un système de vaporisation de façon à étudier des carburants liquides tels que les kérosènes. Les mesures de la fraction volumique de suies, de la concentration des espèces et des profils

de températures ont été obtenues en utilisant respectivement, l'extinction laser, la chromatographie en phase gazeuse et un thermocouple fin. Les cinq kérosènes étudiés sont un kérosène conventionnel Jet A-1 et quatre kérosènes de synthèse. Le premier est un kérosène 100% synthétique FSJF (Fully Synthetic Jet Fuel) qui est un kérosène dérivé du charbon et converti en carburant liquide grâce au procédé de synthèse Fischer-Tropsch (CtL : Coal-to-Liquid). Celui-ci est produit par la compagnie Sasol. Le second est un kérosène synthétique paraffinique, aussi obtenu via la synthèse F-T (FT-SPK), mais celui-ci provient de la conversion de gaz naturel (Gas-to-Liquid) et est produit par Shell. Le troisième est un mélange 50/50 de SPK et d'une coupe naphténique. Enfin, le dernier kérosène est aussi un mélange mais de SPK et d'hexanol (20% d'hexanol en volume). Il est mis en évidence dans cette étude que la concentration en particules de suies est très largement dépendante de la fraction d'aromatique présente dans chaque fuel. Les résultats obtenus montrent que les carburéacteurs produisant le plus de particules de suies, dans un ordre décroissant sont : Jet A-1, FSJF, SPK + coupe naphténique, FT-SPK et SPK + hexanol. Il a de plus été démontré qu'il y a une forte corrélation entre la quantité de particule de suies formée et la concentration en benzène dans la flamme, mais que les quantités d'acétylène et de suies ne sont pas proportionnelles (Figure II.3).

Fuel	Aromatics (volume %)
Jet A-1*	18.9
FSJF†	10.7
FT-SPK†	< 0.1
SPK + Naphthenic cut†	4.6
SPK + Hexanol†	< 0.1

* measured by the ASTM D1319 method.
† measured by the IP 436 method [2].

Figure II.3 : Fraction d'aromatique présente dans chaque kérosène étudié [8]

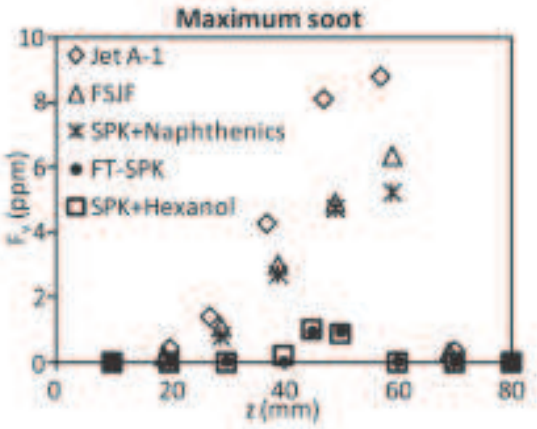


Figure II.4 : Maximum de production de particules de suies de chaque fuel en fonction de la position au-dessus le brûleur [8]

2.2.1.2 *Détermination de délais d'auto-inflammation*

Kahandawala *et al.* [9] ont conduit en 2008 une étude dont le but était de déterminer comment la différence de composition entre plusieurs carburants pouvait avoir un impact sur les délais d'auto-inflammation et l'émission de particules. Les carburants considérés sont deux kérosènes actuels et leurs carburants-modèles respectifs. Le premier est un kérosène conventionnel appelé JP-8 utilisé dans l'aviation militaire. Son carburant-modèle est composé d'un mélange de 80% de n-heptane et de 20% de toluène. L'autre carburant est un kérosène synthétique obtenu par le procédé de synthèse Fischer-Tropsch (SPK). Son carburant-modèle est le 2-méthylheptane. Les mesures expérimentales ont été menées en tube à choc afin d'obtenir les délais d'auto-inflammation et les rendements en HAP et suies derrière l'onde de choc réfléchie. Ces mesures ont été faites entre 1100 et 1950 K, à une pression de 21 atm et à deux richesses Φ = 0,5 et 3. Les résultats de leurs expériences ont montré que le kérosène synthétique et son carburant-modèle produisent beaucoup moins de particules de suies et d'hydrocarbures aromatiques polycycliques que le kérosène conventionnel JP-8 et son carburant-modèle. Leurs résultats sont en accord avec ceux obtenus en turbomoteur T63 par Corporan *et al* [3]. Pour ce qui est des délais d'auto-inflammation, les résultats expérimentaux montrent des valeurs similaires pour le carburant de synthèse et le JP-8, ainsi que leurs carburants-modèles. Aucune corrélation n'a donc pu être faite entre, d'une part la différence de composition des carburants et l'émission de suies et, d'autre part, les délais d'auto-inflammation dans les conditions étudiées.

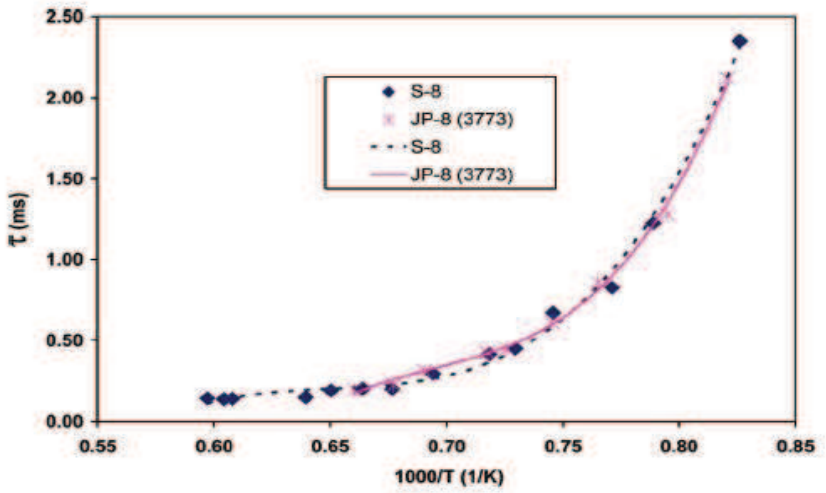


Figure II.5 : Délais d'auto-inflammation mesurés en tube à choc à Φ = 0,5 [9]

La même année, Huber *et al.* [10] se sont intéressés essentiellement aux caractéristiques thermo-physiques d'un carburant de substitution d'un kérosène synthétique S-8. Ce kérosène de substitution était principalement composé de 3-méthyldécane et de 2,6-diméthyloctane. Ils ont effectué leurs mesures au moyen d'un appareil de distillation avec lequel ils ont pu déterminer des propriétés telles que la volatilité, la densité et la viscosité de ce carburant.

Des travaux ont été menés en 2008 par Gokulakrishnan *et al.* [11] sur l'oxydation d'un kérosène synthétique S-8 et d'un kérosène militaire JP-8. Une étude expérimentale a été réalisée afin de déterminer les délais d'auto-inflammation de ces deux kérosènes. Ces expériences ont été menées en réacteur à écoulement à pression atmosphérique, pour des températures comprises entre 900 et 1200 K et pour des richesses allant de 0,5 à 1,5. Leurs résultats ont montrés des délais plus courts pour le kérosène de synthèse S-8 par rapport au kérosène JP-8. Cela est expliqué par le pourcentage d'hydrocarbures aromatiques quasiment nul dans le kérosène de synthèse S-8, qui sont des composés qui s'auto-enflamment plus difficilement que les autres composés présents dans ces kérosènes.

Kumar *et al.* [12] ont publié en 2010 leurs travaux sur la mesure de délais d'auto-inflammation d'un kérosène alternatif et de deux kérosènes conventionnels en machine à compression rapide. Leurs expériences ont été menées dans une gamme de température allant de 615 à 933 K, pour des richesses comprises entre 0,43 et 2,29 et à des pressions de 7, 15 et 30 bars. Le kérosène de synthèse est un kérosène S-8 qui est un mélange d'hydrocarbures, essentiellement des alcanes linéaires et ramifiés de C_7 à C_{18}. Ce kérosène a été produit par la

société Syntroleum par la synthèse F-T à partir de gaz naturel (GtL). Les résultats obtenus lors de ces expériences montrent une auto-inflammation en deux étapes du kérosène S-8. Un coefficient négatif de température, caractéristique de la combustion des hydrocarbures lourds, est aussi observé. Une comparaison des délais d'auto-inflammation du kérosène alternatif S-8 avec les deux kérosènes dérivés du pétrole, dont un Jet-A et un JP-8, a été effectuée dans le but de mieux comprendre la réactivité relative de ces carburants. Ils ont constaté une combustion similaire pour les trois carburéacteurs, comportant deux étapes et un coefficient négatif de température. Cependant, dans les mêmes conditions, ils ont observé des délais d'auto-inflammation plus courts pour le kérosène S-8 par rapport aux deux kérosènes conventionnels Jet-A et JP-8 (Figure II-6). De plus, ils ont mis en évidence que le coefficient négatif de température était moins prononcé à haute pression et que la richesse du mélange avait un impact très important sur les délais d'auto-inflammation. Enfin, ils ont montré que les délais d'auto-inflammation sont directement liés à l'indice de cétane du carburant considéré, avec des temps plus court pour les carburants ayant un indice de cétane plus élevé.

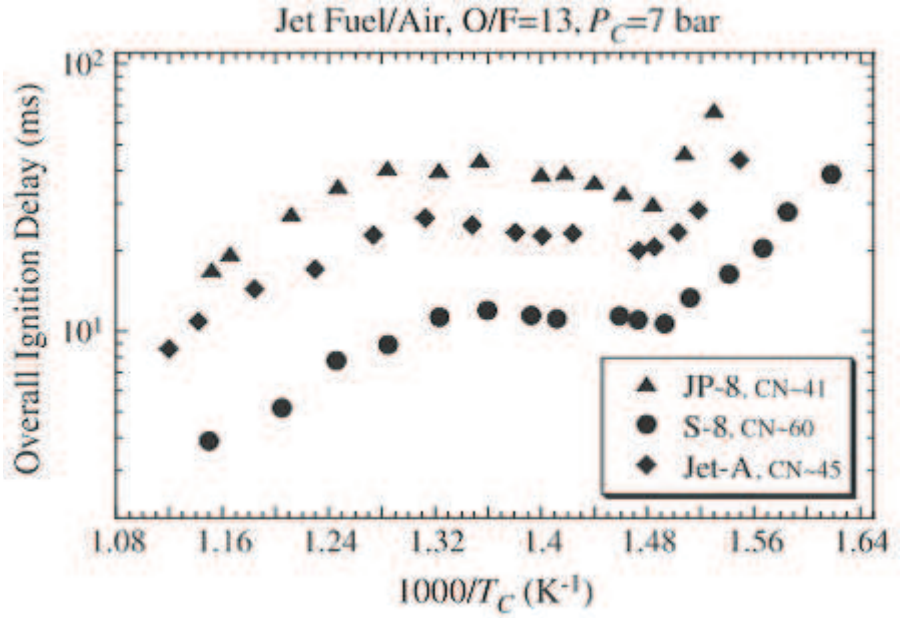


Figure II.6 : Comparaison des délais d'auto-inflammation des mélanges S-8/air, Jet-A/air et JP-8/air, à 7 bars, avec un rapport massique oxygène/carburant de 13 [12]

Wang *et al.* [13] présentent, dans leurs travaux de 2012, une étude sur les délais d'auto-inflammation obtenus avec cinq kérosènes conventionnels et de synthèse. Les deux kérosènes dérivés du pétrole sont un Jet-A et le mélange d'un Jet-A avec les additifs d'un kérosène JP-8. Les trois autres carburants sont trois kérosènes alternatifs Fischer-Tropsch. Deux d'entres eux sont des Gas-to-Liquid (S-8 et GtL Shell). Le troisième est un Coal-to-

Liquid (Sasol IPK), synthétisé par Sasol. Les expériences ont été réalisées à l'aide d'un tube à choc chauffé à des pressions allant de 8 à 39 atm, pour des températures comprises entre 651 et 1381 K et pour des mélanges kérosène/air ayant des richesses comprises entre 0,25 et 1,5. Les délais d'auto-inflammation ont été déterminés par mesure de la pression et par chimiluminescence des radicaux OH excités électroniquement derrière l'onde de choc. Ils ont eux aussi constaté une combustion du carburant en deux étapes, séparées par une zone de coefficient négatif de température. A une pression de 20 atm, la zone de réactivité de basse température se situe à des températures inférieures à 750 K. La zone de coefficient négatif de température a lieu entre 750 et 900 K et la zone de réactivité de haute température se situe au-delà de 900 K. Les résultats de leurs expériences menées dans une très large gamme de conditions ont montré que les délais d'auto-inflammation d'un mélange Jet-A/air étaient fortement dépendants de la température, de la pression et de la richesse du mélange. La comparaison des délais d'auto-inflammation du Jet-A et des trois kérosènes F-T n'a montré aucune différence notable entre ces carburants pour des températures supérieures à 1000 K. En revanche, dans la zone de coefficient négatif de température et dans la zone de réactivité de basse température, plusieurs différences ont été constatées entre les kérosènes de synthèse. Ces différences, liées à une composition variable de ces kérosènes, peuvent atteindre un facteur 3 et sont corrélées à l'indice de cétane de ces carburéacteurs.

En 2012, Hui *et al.* [14] ont publié leurs travaux de recherche sur plusieurs kérosènes dont un Jet-A conventionnel et six kérosènes alternatifs : trois kérosènes synthétiques paraffiniques produit par la synthèse F-T dont un S-8 de Syntroleum, un GtL produit par Shell et un IPK (Iso-Paraffinic Kérosène) de Sasol, ainsi que trois kérosènes renouvelables hydro-traités (Hydrotreated Renewable Jet, HRJ). Tous ces kérosènes ont été étudiés expérimentalement de façon à obtenir leurs caractéristiques fondamentales : indice de cétane, délais d'auto-inflammation, vitesse de flamme laminaire et taux d'étirement à l'extinction pour une combustion en pré-mélange. Les délais d'auto-inflammation et les indices de cétane de chaque carburéacteur ont été déterminés à l'aide d'un appareil de contrôle de l'inflammation des carburants (Fuel Ignition Tester) conformément à la méthode ASTM D7170. De plus, les délais d'auto-inflammation ont aussi pu être déterminés grâce à une machine à compression rapide chauffée, sur des mélanges avec un ratio massique air/carburant de 13 et comprimés sous une pression de 22 bars. Ils ont étudié l'influence de la pression et de la température initiale sur le comportement des délais d'auto-inflammation de chaque mélange. Les résultats ont montré que l'indice de cétane des kérosènes alternatifs

étudiés était supérieur à celui du Jet-A, sauf pour l'IPK de Sasol. Ils ont montré de plus que les délais d'auto-inflammation des kérosènes alternatifs étaient plus courts que ceux du Jet-A. Enfin, ils ont mis en évidence que ces délais sont sensibles et dépendants de la composition et de la structure des carburants.

Au cours de la même année, Dooley *et al.* [15] ont mené une étude sur un kérosène alternatif S-8 (POSF 4734) produit par la synthèse Fischer-Tropsch à partir de gaz naturel. Un carburant-modèle a de plus été formulé en suivant une méthodologie pour simuler les phénomènes de cinétique chimique se déroulant lors de la combustion du S-8. Ce carburant-modèle est composé de 51,9% de n-dodécane et 48,1% d'iso-octane en moles. La validité de ce carburant-modèle et le potentiel de la méthode de formulation de celui-ci ont été évalués par la mesure expérimentale de phénomènes de combustion de ces deux carburants. Le délai d'auto-inflammation de chacun de ces kérosènes est un des phénomènes observés. Les mesures ont été effectuées en tube à choc pour des mélanges stœchiométriques dans l'air, dans une gamme de températures allant de 667 à 1223 K et à 20 atm. Les résultats qu'ils ont obtenus montrent que les délais du S-8 et du carburant-modèle formulé sont très proches.

En 2012, la cinétique d'oxydation d'un kérosène 100% synthétique de type Coal-to-Liquid (CtL) a été étudiée par Mzé-Ahmed *et al.* [16] en utilisant trois dispositifs expérimentaux différents (tube à choc, brûleur Bunsen, réacteur auto-agité par jets gazeux). Un tube à choc a été utilisé pour mesurer les délais d'auto-inflammation de mélanges $CtL/O_2/N_2$. Ces mesures ont été effectuées à une pression d'environ 16 bars, pour des températures comprises entre 900 et 1400 K et pour des richesses allant de 0,5 à 1. Les délais d'auto-inflammation ont été mesurés par détection de l'émission des radicaux CH* à 431 nm derrière l'onde de choc. Ces résultats ont ensuite été comparés à leurs données obtenues par modélisation, avec un mélange de n-décane, d'iso-octane, de n-propylcyclohexane et de n-propylbenzène.

Dans leur dernière étude datant de 2014, Dagaut *et al.* [17] ont effectué des expériences similaires à celles de Mzé-Ahmed *et al.* [16] avec un kérosène 100% synthétique provenant de la conversion de gaz naturel (GtL), donc ayant une composition différente du CtL. Leurs expériences on été menées avec trois dispositifs expérimentaux (tube à choc, brûleur Bunsen, réacteur auto-agité par jets gazeux). En tube à choc, ils ont mesuré des délais d'auto-inflammation à une pression d'environ 16 bars, sur une gamme de températures allant

de 650 à 1400 K et pour des richesses de 0,5 et 1. Les délais d'auto-inflammation ont été mesurés derrière l'onde de choc par détection du maximum d'émission des radicaux CH* à 431 nm. Un carburant-modèle à trois composants constitué de n-décane, d'iso-octane et de n-propylcyclohexane a ensuite été développé pour représenter la combustion du GtL. Les données expérimentales et les simulations ont été comparées de façon à valider le modèle.

2.2.1.3 *Détermination de vitesse de flamme laminaire*

En 2010, Kumar *et al.* [18] ont publié leurs travaux sur l'étude d'un kérosène conventionnel Jet-A et d'un kérosène de synthèse S-8 provenant de la synthèse F-T. Ils ont étudié la vitesse de propagation de flammes laminaires et le taux d'étirement à l'extinction de flammes S-8/O_2/azote. Pour cela ils ont utilisé un brûleur à contre-courant à pression atmosphérique, à trois températures d'admission des gaz frais (400, 450 et 470 K) et à des richesses comprises entre 0,7 et 1,4. Ils ont obtenu des vitesses de flammes laminaires maximales pour les mélanges ayant une richesse proche de la stœchiométrie. Les résultats de cette étude ont permis de comparer des vitesses de flammes laminaires d'un kérosène conventionnel Jet-A, d'un kérosène synthétique S-8 et du n-décane pur. Sur la figure II.7, on peut voir que les profils de vitesse de flamme du Jet-A et du S-8 sont très proches. Les vitesses mesurées avec le n-décane sont très légèrement supérieures. Ils démontrent ainsi qu'en terme de propagation de flamme (vitesse de flamme laminaire et étirement à l'extinction des flammes), le kérosène (Jet-A) dérivé du pétrole et le kérosène de synthèse F-T (S-8) présentent les mêmes caractéristiques.

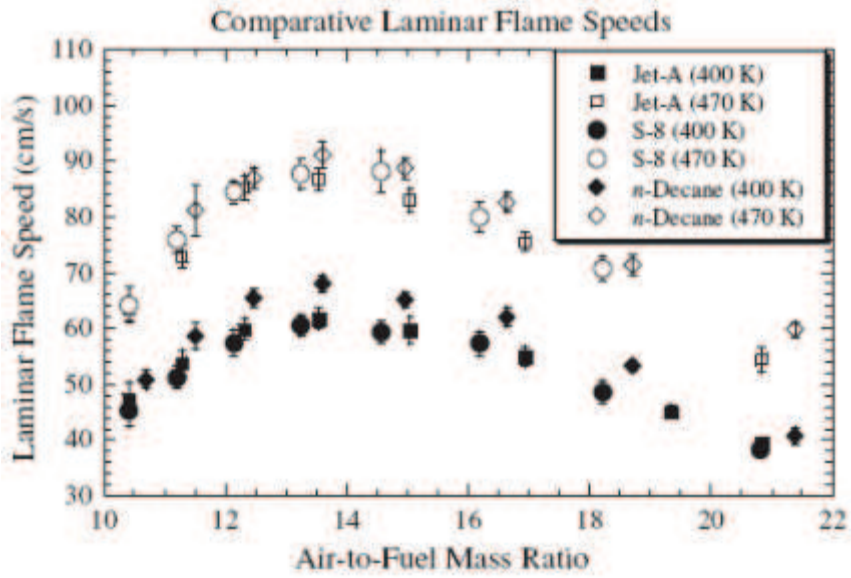


Figure II.7 : Comparaison des vitesses de flammes laminaires d'un kérosène conventionnel Jet-A, d'un kérosène synthétique S-8 et du n-décane [18]

Ji *et al.* [19] ont mené en 2011 une étude sur les vitesses de flammes laminaires et les limites d'extinction de flammes pré-mélangées et non pré-mélangées de kérosènes conventionnels, du « Jet Propellant 7 » (JP-7) et du « Jet Propellant 8 » (JP-8), et de kérosènes alternatifs (synthétiques et biologiques). Trois kérosènes alternatifs ont été étudiés dont deux kérosènes de synthèse (un S-8 de Syntroleum et un GtL de Shell), et un bio-kérosène R-8 issus de la conversion de biomasse. Ils ont effectué leurs expériences sur un brûleur à contre-courant à pression atmosphérique. Les résultats obtenus pour les trois carburéacteurs sont très similaires, cependant, les vitesses sont supérieures à celles des deux kérosènes conventionnels JP-7 et JP-8. Ces résultats ont été comparés à ceux obtenus pour des flammes de n-décane et de n-dodécane, deux molécules définies comme de possibles substituts pour représenter la combustion de ces carburants. Les résultats montrent que les vitesses de flammes obtenues avec le n-dodécane [20] sont très proches de celles des trois kérosènes alternatifs.

En 2012, Kick *et al.* [21] ont présenté dans leurs travaux une étude sur plusieurs kérosènes alternatifs dont un GtL, un CtL et des mélanges composés de GtL avec 20% de 1-hexanol ou 50% de coupe naphténique. Ils ont mesuré les vitesses de flammes de chacun des kérosènes, à pression atmosphérique, à des températures élevées et pour des richesses de 1 et 1,4. Pour effectuer ces mesures ils ont utilisé un brûleur à flamme conique. Ces résultats expérimentaux ont été utilisés pour valider un mécanisme développé par Dagaut *et al.* [22, 23] composé de 4642 réactions et faisant intervenir 1075 espèces. Les résultats de la simulation

montrent un assez bon accord avec les mesures dans la gamme de conditions considérées dans cette étude.

Dans leur étude de 2012, Hui *et al.* [14] ont déterminé les vitesses de flammes laminaires à pression atmosphérique ainsi que le taux d'étirement à l'extinction de flammes d'un kérosène conventionnel Jet-A, de trois kérosènes synthétiques paraffiniques F-T et de trois kérosènes renouvelables hydro-traités (HRJ). Ces mesures ont été effectuées avec un brûleur à contre-courant pour des flammes de pré-mélange. Les données ont été récoltées pour deux températures de gaz frais (400 K et 470 K) et pour des richesses comprises entre 0,7 et 1,4 lors des mesures de vitesses de flammes, et comprises entre 0,9 et 1,6 lors des mesures de taux d'étirement des flammes à l'extinction. Les résultats de ces études n'ont montré aucune différence notable entre les vitesses de flammes des différents kérosènes, cependant, ils ont montré que les carburants alternatifs concernés par ces travaux étaient plus résistants à l'extinction que le Jet-A (Figure II.8). Ils en déduisent que ce résultat peut venir de la fraction plus importante d'aromatiques présente dans ce kérosène issu du pétrole.

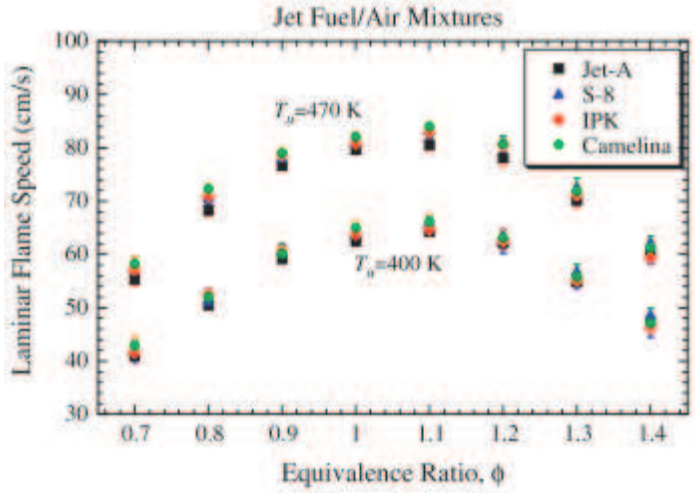


Figure II.8 : Vitesses de flammes laminaires d'un Jet-A, de deux kérosènes F-T (S-8 et IPK) et d'un kérosène renouvelable hydro-traité (Camelina) [14]

Dooley *et al.* [15] ont effectué en 2012 des mesures de limites d'extinction à l'étirement de flammes de diffusion à pression atmosphérique d'un kérosène de synthèse F-T S-8 et du carburant-modèle formulé pour représenter le S-8 (voir précédemment). Ces mesures ont été réalisées grâce à un brûleur à contre-courant, avec le carburant arrivant d'un côté et chauffé à 500 K et de l'air synthétique à 298 K arrivant de l'autre. Les valeurs des taux d'étirement à l'extinction des flammes des deux carburants ne montrent pas de différences

significatives. Ils montrent ainsi que leur carburant-modèle reproduit correctement les données pour le S-8 obtenues sur brûleur.

Mzé-Ahmed *et al.* [16] ont publié en 2012 leurs travaux sur la cinétique d'oxydation d'un kérosène 100% synthétique de type Coal-to-Liquid (CtL). Ils ont effectué une série d'expériences sur trois dispositifs expérimentaux différents. L'un de ces dispositifs était un brûleur à flamme conique avec lequel ils ont pu mesurer les vitesses de flammes laminaires de ce kérosène synthétique. Ces mesures ont été faites à deux pressions : p = 1 bar pour des richesses allant de 0,95 à 1,4, et p = 3 bars pour des richesses comprises entre 0,95 et 1,3. La température de préchauffage des gaz était de 473 K. Les résultats ont pu être comparés à des données expérimentales obtenues avec un Jet A-1, mais ceux-ci ne montrent pas de différences majeures entre ces deux carburéacteurs. Enfin, Ils ont comparé leurs résultats aux vitesses obtenues par modélisation avec un mélange constitué de n-décane, d'iso-octane, de n-propylcyclohexane et de n-propylbenzène.

En 2014, Dagaut *et al.* [17] ont mené une série d'expériences similaires à celles effectuées par Mzé-Ahmed *el al.* [16]. Ces expériences ont cependant été effectuées sur un kérosène 100% synthétique provenant de la conversion de gaz naturel (GtL), donc ayant une composition différente. Leurs expériences ont été effectuées sur trois dispositifs expérimentaux dont un brûleur à flamme conique de façon à obtenir la vitesse de propagation d'une flamme laminaire d'un mélange GtL/O_2/N_2. Ces mesures ont été faites à pression atmosphérique, avec un préchauffage des gaz à 473 K et pour des richesses allant de 1 à 1,5. Ils ont comparé les résultats obtenus par ces mesures à d'autres données expérimentales obtenues avec un Jet A-1, n'indiquant aucune différence notable. Pour finir, ils ont modélisé leurs résultats grâce au modèle constitué de n-décane, d'iso-octane et de n-propylcyclohexane.

2.2.1.4 *Détermination de profils d'espèces*

Mzé-Ahmed et al. [23] ont présenté en 2010 une étude de la cinétique d'oxydation d'un carburant 100 % synthétique composé de 79,9% d'iso-alcanes, 19,6% de n-alcanes et 0,5% d'aromatiques en masse et d'un mélange 50/50 de ce carburant de synthèse avec du kérosène conventionnel Jet A-1. Les expériences ont été effectuées en réacteur parfaitement agité (JSR) à une pression de 10 atm, dans une gamme de températures allant de 560 à 1030 K, pour des

richesses comprises entre 0,5 et 2 et avec une concentration initiale de carburant de 1000 ppm. Les profils de fractions molaires des produits et intermédiaires stables sont reportés en fonction de la température. Ces résultats montrent que le kérosène 100% synthétique est plus réactif que le mélange 50/50 avec le Jet A-1. En effet, ils observent une concentration des principales espèces stables plus précoces pour celui-ci. Cette différence provient de la fraction d'alcanes faiblement branchés, plus grande dans le cas du carburant synthétique qui induit une plus grande réactivité. On retrouve une plus grande formation de méthane, du fait d'une plus grande concentration en hydrocarbures branchés, et une production similaire des espèces CO, CO_2 et H_2O.

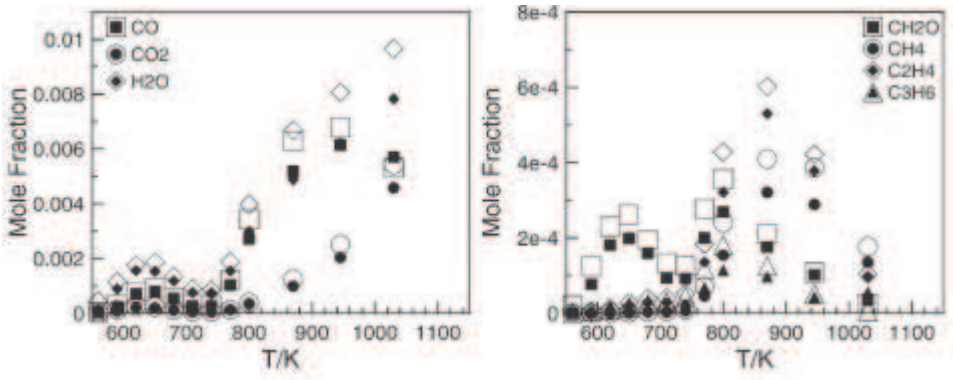


Figure II.9 : Profils de concentration d'espèces pour l'oxydation de 1000 ppm de kérosène conventionnel (symboles pleins) et de kérosène synthétique (symboles vides) [23]

Dans leur étude de 2012, Dooley *et al.* [15] ont étudié l'oxydation d'un kérosène synthétique F-T S-8 et de son kérosène modèle composé de n-dodécane et d'iso-octane, en réacteur à écoulement à pression variable. Ces expériences ont été réalisées pour des mélanges stoechiométriques, à une pression de 12,5 atm, dans une gamme de températures comprises entre 500 et 1050 K et pour un temps de passage de 1,8 s. Les résultats obtenus ont montré que le kérosène de synthèse et son carburant-modèle s'oxydent de la même manière, en présentant les trois régimes de combustion typiques des hydrocarbures lourds. Les profils d'espèces étant très proches, ils en concluent que le carburant-modèle représente convenablement l'oxydation du kérosène de synthèse S-8.

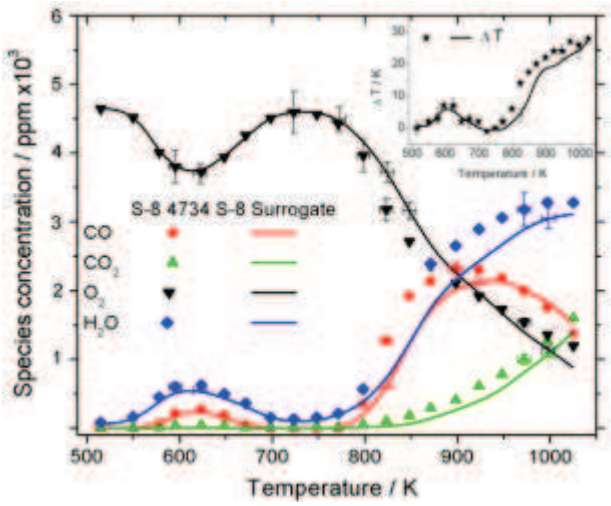


Figure II.10 : Profils d'espèces obtenus en réacteur à écoulement à 12,5 atm, 0,3% de carburant, φ=1, τ=1,8 s, pour un kérosène S-8 (symboles) et son carburant-modèle n-dodécane/iso-octane (lignes) [15]

Au cours de la même année, la cinétique d'oxydation d'un kérosène 100% synthétique de type Coal-to-Liquid (CtL) a été étudiée par Mzé-Ahmed *et al.* [16]. Ils ont effectué pour cela trois séries d'expériences sur trois dispositifs expérimentaux différents. Précédemment, nous avons résumé leurs résultats obtenus en tube à choc et sur brûleur à flamme conique. Le dernier dispositif qu'ils ont utilisé était un réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR). Les expériences ont été menées à une pression de 10 bars, un temps de passage constant de 1 s, dans une gamme de températures comprises entre 570 et 1070 K et pour des richesses de 0,5, 1 et 2. Les profils des fractions molaires des réactifs, des intermédiaires stables et des produits au sein du réacteur ont été obtenus, en fonction de la température, par échantillonnage grâce à une sonde sonique, suivie par différentes techniques d'analyses en ligne et hors ligne, i.e., la chromatographie en phase gazeuse et la spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier. Ils ont comparé les profils obtenus avec ceux d'un kérosène conventionnel Jet A-1 (Figure II.11). Ensuite ces résultats ont été modélisés grâce à un mélange de n-décane, d'iso-octane, de n-propylcyclohexane et de n-propylbenzène et les données obtenues ont pu être comparées aux données expérimentales.

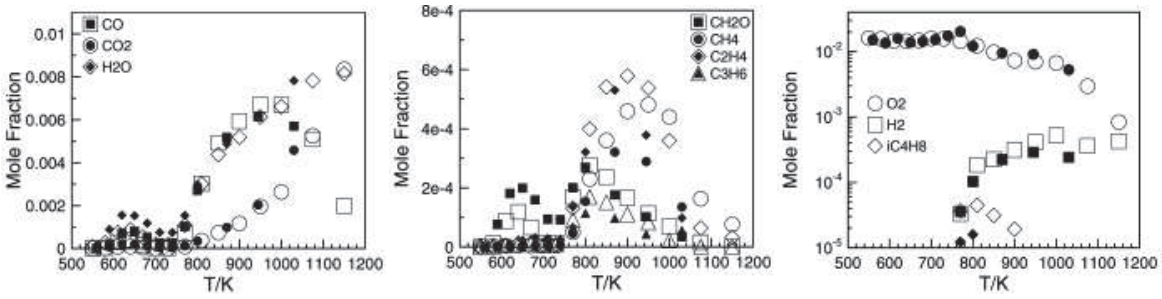


Figure II.11 : Comparaison des profils expérimentaux en JSR d'un kérosène conventionnel Jet A-1 (symboles pleins) et d'un kérosène synthétique CtL (symboles vides) [16]

En 2014, Dagaut *et al.* [17] ont effectué des expériences similaires à celles de Mzé-Ahmed *el al.* [16] mais avec un kérosène 100% synthétique provenant de la conversion de gaz naturel (GtL). Leurs expériences ont été effectuées sur trois dispositifs expérimentaux dont un tube à choc et un brûleur à flamme conique, comme présenté précédemment. La dernière série de mesure effectuée par Dagaut *et al.* s'est faite en réacteur auto-agité par jets gazeux maintenu à une pression de 10 bars. Les mesures ont été menées à un temps de passage constant de 1 s, dans une gamme de températures allant de 550 à 1150 K et pour des mélanges ayant des richesses de 0,5, 1 et 2. Grâce à un échantillonnage par sonde sonique au centre du réacteur, suivie par une batterie de techniques d'analyse en ligne et hors ligne (chromatographes en phase gazeuse et spectromètre infrarouge à transformée de Fourier), ils ont obtenu les profils des fractions molaires des réactifs, des intermédiaires stables et des produits formés, en fonction de la température, lors de la combustion du kérosène. Ces données expérimentales ont ensuite été comparées à celles obtenues pour le GtL étudié par Mzé-Ahmed *et al.* [16] et à un kérosène conventionnel Jet A-1. Enfin, ces résultats ont été modélisés avec un carburant-modèle constitué de n-décane, d'iso-octane et de n-propylcyclohexane et les données expérimentales et simulées ont été comparées.

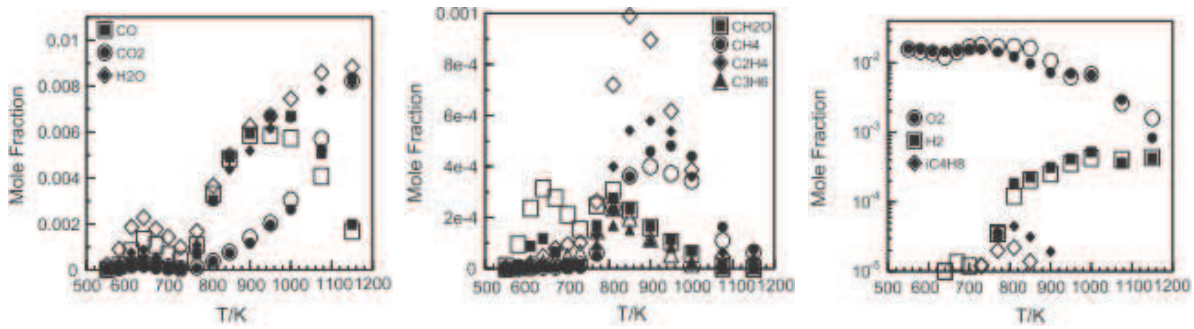


Figure II.12 : Comparaison des profils expérimentaux en JSR d'un CtL (symboles pleins) [16] et d'un GtL (symboles vides) [17]

2.2.1.5 *Récapitulatifs des données expérimentales*

Tableau II.1 : Résumé non exhaustif des travaux disponibles dans la littérature pour l'oxydation de kérosène de synthèse

Référence	Dispositif exp.	Conditions expérimentales			Résultats
		T (K)	P (bar)	Φ	
Corporan *et al.* [3]	chambre de combustion	450	1,5-10	0,6-1,1	émissions profils d'espèces
Saffaripour *et al.* [8]	Brûleur	473	1	/	émissions
Kahandalawala *et al.* [9]	tube à choc	1100-1950	21	0,5 et 3	délai d'auto-inflammation
Gokulakrishnan *et al.* [11]	réacteur à écoulement	900-1200	1	0,5-1,5	délai d'auto-inflammation
Kumar *et al.* [12]	machine à compression rapide	615-933	7, 15 et 30	0,43-2,29	délai d'auto-inflammation
Wang *et al.* [13]	tube à choc	651-1381	8-39	0,25 et 1,5	délai d'auto-inflammation
Hui *et al.* [14]	fuel ignition tester et MCR*	/	22	1,13-1,15	DCN délai d'auto-inflammation
Dooley *et al.* [15]	tube à choc	667-1223	20	1	délai d'auto-inflammation
Mzé-Ahmed *et al.* [16]	tube à choc	900-1400	16	0,5 et 1	délai d'auto-inflammation
Dagaut *et al.* [17]	tube à choc	650-1400	16	0,5 et 1	délai d'auto-inflammation
Kumar *et al.* [18]	brûleur	400, 450 et 470	1	0,7-1,4	vitesse de flamme
Ji *et al.* [19]	brûleur	403	1	0,04-0,1	vitesse de flamme
Kick *et al.* [21]	brûleur à flamme conique	473	1	1 et 1,4	vitesse de flamme
Hui *et al.* [14]	brûleur à contre-courant	400 et 473	1	0,7 et 1,4	vitesse de flamme limites d'extinction
Dooley *et al.* [15]	brûleur à contre-courant	500	1	1	vitesse de flamme
Mzé-Ahmed *et al.* [16]	brûleur à flamme conique	473	1 et 3	0,95-1,4	vitesse de flamme
Dagaut *et al.* [17]	brûleur à flamme conique	473	1	1-1,5	vitesse de flamme
Mzé-Ahmed *et al.* [23]	JSR	560-1030	10	0,5, 1 et 2	profils d'espèces
Dooley *et al.* [19]	réacteur à écoulement	500-1050	12,5	1	profils d'espèces
Mzé-Ahmed *et al.* [16]	JSR	570-1070	10	0,5, 1 et 2	profils d'espèces
Dagaut *et al.* [17]	JSR	550-1150	10	0,5, 1 et 2	profils d'espèces

* Machine à compression rapide

Plusieurs études ont donc été effectuées au cours des années précédentes au moyen de différents dispositifs expérimentaux avec plusieurs kérosènes de synthèse ayant des origines, et donc des compositions, variables (Tableau II.1). Ces expériences ont montré dans la majeure partie des cas des comportements similaires à ceux observés lors de la combustion de kérosènes conventionnels dérivés du pétrole.

2.2.2 Etudes des mécanismes cinétiques

Afin de mieux comprendre et prédire les phénomènes de combustion lors de l'utilisation de kérosènes synthétiques, des mécanismes cinétiques détaillés sont développés. Les carburéacteurs de synthèse ont une composition moins complexe que les carburéacteurs dérivés du pétrole, mais sont tout de même constitués de plusieurs centaines d'hydrocarbures [24]. Cette composition varie en fonction de l'origine et du mode de fabrication de ces kérosènes de synthèse. En général, des mélanges simplifiés de n-paraffines et d'iso-paraffines sont choisis comme carburant-modèle pour simuler l'oxydation de ces kérosènes. Cependant, de nombreuses études mettent en perspective l'utilisation de mélanges modèles plus complexes pour améliorer la modélisation.

Gokulakrishnan *et al.* [11] ont étudié en 2008 l'oxydation d'un kérosène de synthèse composé d'un mélange de 80% d'iso-paraffines et de 20% de n-paraffines en volume. Pour modéliser leurs résultats (JP-8 et du S-8) ils ont développé un mécanisme cinétique chimique de haute température comportant 2000 réactions et faisant intervenir 700 espèces. Ce mécanisme contient les réactions du n-décane, du n-propylbenzène, du n-propylcyclohexane, du décène et de l'iso-octane. Ils ont effectué des analyses de sensibilité qui montrent le faible impact des iso-paraffines sur les délais d'auto-inflammation dans les zones de hautes températures. En revanche, dans la zone de coefficient négatif de température CNT (entre 700 et 900 K), la présence d'iso-paraffines peut avoir un effet notable sur les délais d'auto-inflammation (augmentation) des carburéacteurs de synthèse.

Dans une étude de 2010, Mzé-Ahmed *et al.* [23] modélisent leurs expériences effectuées en réacteur auto-agité en utilisant un mécanisme cinétique mettant en jeu 6228 réactions et faisant intervenir 2006 espèces. Le mécanisme utilisé pour la simulation provient

d'études antérieures et a été développé par Dagaut *et al.* [25 - 28] pour représenter l'oxydation d'un kérosène conventionnel Jet A-1 (n-décane/n-propylcyclohexane/n-propylbenzène). A ce mécanisme a été ajouté un sous-mécanisme de l'iso-octane (2,2,4-triméthylpentane) [29] pour représenter la famille chimique des iso-alcanes, très présente dans les kérosènes de synthèse. Pour la modélisation, ils utilisent le code de calcul PSR (CHEMKIN) afin de calculer les profils de concentration des espèces en fonction de la température. La cinétique d'oxydation du mélange modèle, développé pour représenter la combustion du kérosène de synthèse, est conduite par l'oxydation du n-décane qui présente la plus grande réactivité. Une analyse des voies de décomposition a montré l'importance primordiale de la production et de la consommation des radicaux OH, en grande partie responsables de l'oxydation du carburant. Ils trouvent un accord raisonnable entre modélisation et expérience pour une combustion riche, mais des améliorations sont nécessaires pour simuler correctement l'oxydation du SPK dans des conditions pauvres. Aussi, cette étude a montré que l'iso-octane est une molécule trop ramifiée pour représenter la famille chimique des iso-alcanes dans un kérosène de synthèse. Ils proposent donc en perspective de refaire cette étude, mais avec un composé moins branché.

En 2011, Naik *et al*. [24] ont développé un mécanisme cinétique détaillé pour représenter la combustion de trois kérosènes alternatifs différents, dont un S-8 de Syntroleum, un GtL de Shell et un bio-kérosène R-8. Un mélange constitué de n-décane, de n-dodécane et d'iso-octane a été choisi pour modéliser l'oxydation des trois carburéacteurs. Le mécanisme utilisé est composé des sous-mécanismes de ces trois molécules. Pour représenter chacun des kérosènes, les proportions de n-décane, de n-dodécane et d'iso-octane ont été déterminées par le logiciel de calcul Surrogate Blend Optimizer SBO. Le mécanisme cinétique a été développé par fusion des mécanismes de haute température des alcanes, élaborés par Westbrook *et al.* [30], comprenant un sous-mécanisme de basse et de haute température des espèces en C_0-C_2, et du mécanisme de l'iso-octane élaboré par Curran *et al.* [31]. Le mécanisme cinétique résultant est alors composé de 3556 réactions faisant intervenir 564 espèces. Afin de prédire les émissions en oxydes d'azotes et en particules de suies, Naik *et al.* ont intégré un sous-mécanisme des NO_x faisant intervenir 33 espèces et 298 réactions [32, 33] et un sous-mécanisme d'oxydation des Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques, précurseurs des suies [34-36], composé de 156 espèces et 814 réactions. Ainsi, le mécanisme cinétique final développé pour représenter l'oxydation des trois kérosènes alternatifs (S-8, GtL Shell, R-8) est constitué de 753 espèces intervenant dans 4668 réactions. Les résultats simulés sont en accord avec les données expérimentales obtenues en tube à choc par Davidson *et al.* [37] et

Vermeer *et al.* [38] pour l'oxydation de l'iso-octane. La modélisation des délais d'auto-inflammation montre un bon accord avec les profils expérimentaux obtenus par Pfahl *et al.* [39] pour l'oxydation du n-décane et par Vasu *et al.* [40] pour l'oxydation du n-dodécane. De même, le mécanisme simule correctement les températures d'auto-inflammation obtenues par Bieleveld *et al.* [41] sur brûleur avec des flammes d'iso-octane. Les vitesses de flammes laminaires mesurées par Kumar *et al.* [42] et Ji *et al.* [43, 44] sont modélisées de manière acceptable par ce même mécanisme. Ils ont aussi obtenus de bonnes représentations des vitesses de flammes laminaires de l'iso-octane mesurés par Davis et Law [45] et Huang *et al.* [46]. Enfin, ils ont validé leur mécanisme en flamme (vitesse de flamme et étirement à l'extinction) en utilisant les données expérimentales de Ji *et al.* [19] obtenues pour l'oxydation des mêmes kérosènes de synthèse (S-8, Shell GTL et du R-8). On peut voir sur la figure II.13 que le modèle reproduit très bien les données expérimentales. Les émissions de NO_x issues de la combustion des trois kérosènes reformulés (S-8, GTL Shell et R-8) ont aussi été modélisées par Naik *et al.*. Ils obtiennent un bon accord entre les résultats de simulations et les profils expérimentaux.

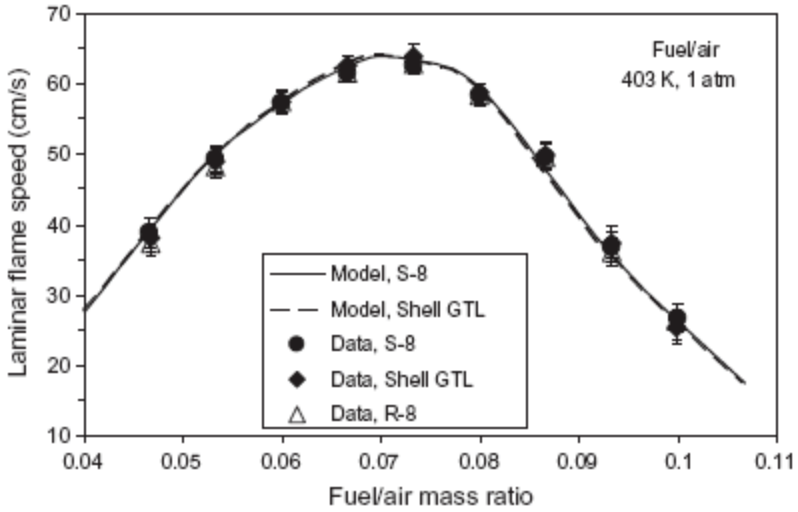


Figure II.13: Comparaisons des vitesses de flammes laminaires mesurées et simulées à une température de 403 K et à pression atmosphérique [24]

Catalanotti *et al.* [47] ont publié en 2011 une étude présentant un modèle développé pour l'oxydation de bio-kérosènes et de kérosènes de synthèse. La partie bio-kérosène est représentée dans le mécanisme par du tridécanoate de méthyle, un ester méthylique avec pour formule brute $C_{18}H_{28}O_2$. La partie kérosène de synthèse est quant à elle représentée par de l'heptane. Ce modèle est basé sur un modèle antérieur des mêmes auteurs concernant

l'oxydation d'un kérosène et du butanoate de méthyle, le AFRM v2.0 (Aviation Fuel Reaction Mechanism). Le mécanisme final comprend ainsi les sous-mécanismes du n-décane, du toluène, du décanoate de méthyle et de l'heptane. Il comprend aussi les mécanismes chimiques de formation des NO_x, des SO_x et des HAP. Au final, il est constitué de 321 espèces et 1639 réactions. Ce mécanisme a été validé en modélisant et en comparant les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité par Dagaut *et al.* [28, 48, 49] pour l'oxydation d'un bio-kérosène et d'heptane pure à plusieurs richesses.

Dans leur publication de 2012, Dooley *et al.* [14] présentent leurs travaux expérimentaux effectués sur l'oxydation d'un kérosène synthétique S-8 et la modélisation de ces résultats. Le modèle cinétique utilisé provient d'une précédente étude de Dooley *et al.* [50] portant sur la méthodologie de construction d'un modèle cinétique pour modéliser l'oxydation d'un kérosène conventionnel. Ce mécanisme s'appuie sur les mécanismes chimiques de décomposition des n-alcanes de Westbrook *et al.* [30] et ceux sur la chimie d'oxydation des iso-alcanes de Mehl *et al.* [51]. Ce mécanisme repose également sur les travaux de Ranzi *et al.* [52] qui décrivent la chimie d'oxydation de mélanges composés de n-dodécane et d'iso-octane. Ce modèle cinétique a été réduit afin de pouvoir modéliser le taux d'étirement à l'extinction de flammes de kérosène de synthèse S-8 et les délais d'auto-inflammation de celui-ci. Le modèle reproduit convenablement les délais, avec cependant un retard non négligeable sur les valeurs expérimentales obtenues pour le kérosène S-8. Les modélisations du taux d'étirement à l'extinction des flammes montrent une grande similitude avec les résultats expérimentaux.

Mzé-Ahmed *et al.* [16] ont mené en 2012 une étude sur l'oxydation d'un kérosène 100% synthétique provenant du procédé de synthèse Fischer-Tropsch à partir du charbon (CtL). Ils ont utilisé pour cela trois dispositifs expérimentaux avec lesquels ils ont obtenus de nombreuses données expérimentales sur l'oxydation de ce kérosène de synthèse dans une large gamme de conditions. Ils ont ensuite développé un mécanisme cinétique chimique détaillé ainsi qu'un mélange modèle constitué de n-décane, d'iso-octane, de n-propylcyclohexane et de n-propylbenzène, pour modéliser l'oxydation du kérosène de synthèse. Les fractions molaires de chacun de ces constituants ont été les suivantes : n-$C_{10}H_{22}$, 0,0472% ; iso-C_8H_{18}, 0,0155% ; n-propylcyclohexane, 0,0445% ; n-propylbenzène, 0,0122%. Ainsi, pour représenter 1000 ppm de CtL avec pour formule brute $C_{11,06}H_{21,6}$, 1193,7 ppm de mélange modèle de formule brute $C_{9,27}H_{18,97}$ ont été nécessaires. Ce mécanisme réactionnel

est dérivé d'études antérieures dans lesquelles l'effort avait été mis sur la modélisation de l'oxydation d'un kérosène conventionnel et d'un kérosène synthétique avec des mélanges modèles simples [23]. Celui-ci est donc constitué des sous-mécanismes du n-décane, de l'iso-octane, du n-propylcyclohexane et du n-propylbenzène, soit au final 8217 réactions faisant intervenir 2185 espèces. Le même modèle a été utilisé pour simuler les expériences menées avec trois dispositifs expérimentaux (tube à choc, brûleur Bunsen, JSR). Comme on le voit sur la figure II.14, en réacteur auto-agité le modèle reproduit convenablement les données expérimentales avec cependant des soucis sur certaines espèces. La modélisation des délais d'auto-inflammation montre un retard par rapport aux expériences. Enfin, les vitesses de flammes simulées sont similaires aux données expérimentales. Mzé-Ahmed *et al.* indiquent que l'amélioration de ce modèle pourrait être obtenue en utilisant un mélange modèle plus complexe.

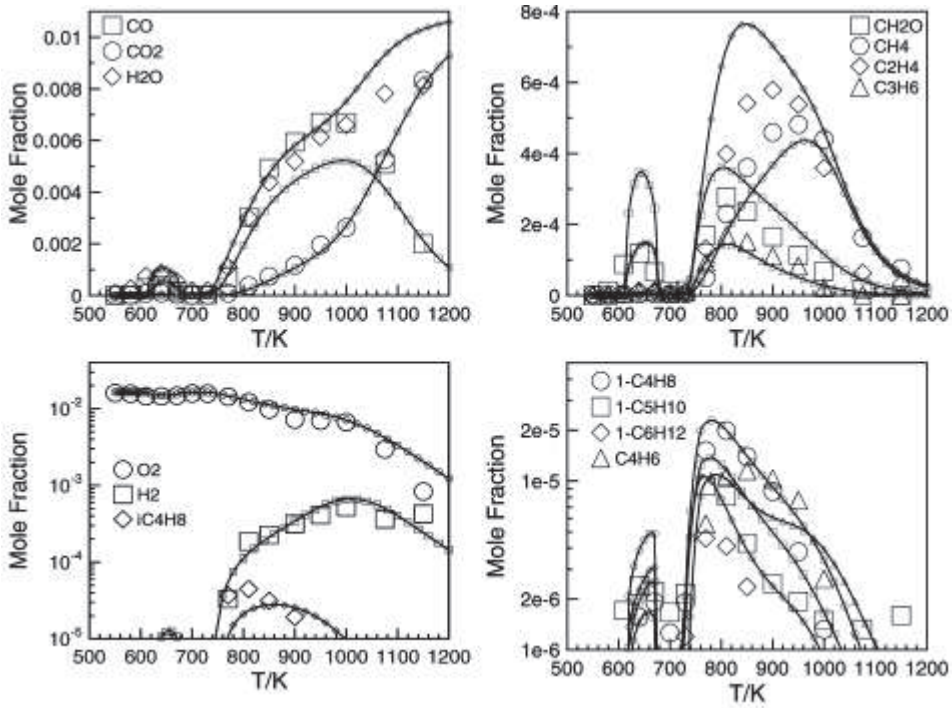


Figure II.14 : Oxydation du CtL à φ=1, *p*=10 bar et τ=1 s. (symboles : données expérimentales ; lignes continues : modélisation) [16]

En 2014, Dagaut *et al.* [17] ont publié une étude portant sur l'oxydation d'un kérosène 100% synthétique provenant de la conversion de gaz naturel (GtL). Ils ont effectué des expériences similaires à celles de Mzé-Ahmed *el al.* [16] en utilisant trois dispositifs expérimentaux différents. Le mécanisme cinétique chimique détaillé utilisé pour modéliser l'ensemble des données expérimentales est le même que celui utilisé par Mzé-Ahmed *et al.*

pour l'étude d'un CtL. On rappelle qu'il est constitué de 2185 espèces intervenant dans 8217 réactions. L'origine de ces carburéacteurs étant différente, leurs compositions chimiques et leurs caractéristiques physico-chimiques sont différentes. Ainsi, afin de modéliser ce GtL composé de n-alcanes, d'iso-alcanes et de naphtènes, le mélange modèle choisi pour représenter chacune des familles chimiques a été un mélange de n-décane, d'iso-octane et de n-propylcyclohexane. Les fractions molaires respectives de chacune de ces molécules ont été de : 0,0652%, 0,0375% et 0,0103%. Comme ce carburant-modèle a pour formule brute $C_{10,45}H_{22,95}$, il leur a donc fallu utiliser 1130 ppm de carburant-modèle pour représenter les 1000 ppm de GtL de formule brute $C_{10,45}H_{23,06}$. Ce mélange modèle représente relativement bien les données expérimentales obtenues avec les trois dispositifs expérimentaux. Néanmoins, il est montré que la simulation pourrait être améliorée par l'emploi d'un mélange plus complexe, ce qui augmenterait la taille du mécanisme et du calcul, ou par modification des proportions du carburant-modèle précédent. Dans cette étude la modification des fractions molaires des constituants du mélange modèle a été testée. Ainsi, le deuxième mélange modèle qu'ils ont développé est constitué des trois mêmes molécules avec les fractions molaires suivantes : 0,073% de n-décane ; 0,0224% d'iso-octane ; 0,0091% de n-propylcyclohexane. L'utilisation de ce deuxième carburant-modèle entraine des améliorations de la simulation des profils d'espèces en réacteur auto-agité à faible richesse, cependant des détériorations de la modélisation des mêmes profils à richesse plus élevée apparaissent.

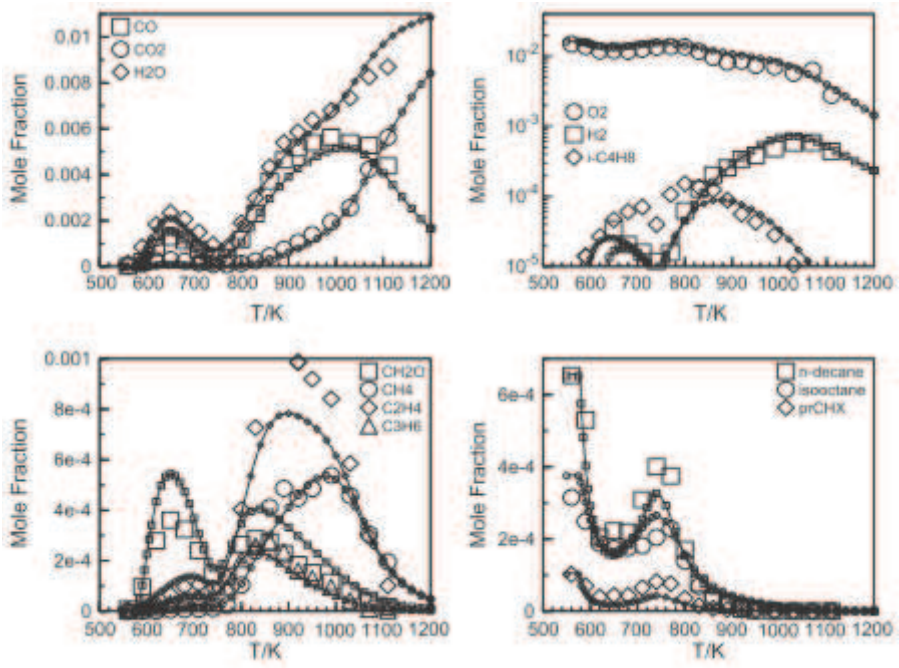


Figure II.15 : Oxydation du GtL à φ=1, *p*=10 bar et τ=1 s. (symboles : données expérimentales ; lignes continues : modélisation) [17]

En 2014, Saffaripour *et al.* [53] ont mené une étude dans laquelle un modèle de formation des particules de suies a été développé pour prédire la concentration, la taille, et la structure des agrégats de particules dans une flamme de diffusion à co-courant laminaire et à pression atmosphérique. Trois carburants sont étudiés dans cette étude, un mélange modèle pour représenter l'oxydation d'un kérosène classique Jet A-1, un mélange modèle pour représenter l'oxydation d'un kérosène synthétique paraffinique et du n-décane pur. Le mélange modèle du Jet A-1 est composé de n-décane, de n-propylbenzène et de n-propylcyclohexane et le mélange modèle du SPK est composé de n-décane, d'iso-octane et de n-propylcyclohexane. Un mécanisme cinétique, contenant 2185 espèces intervenant dans 8217 réactions, a été réduit et combiné avec un schéma de formation et de croissance d'hydrocarbures aromatiques polycycliques pour modéliser la structure des flammes et la formation des précurseurs de suies. Ce mécanisme a ensuite été couplé à un modèle dynamique transversal très détaillé pour prédire la fraction volumique, la structure et la taille des particules de suies en considérant de nombreux paramètres comme la nucléation des HAP, la croissance de surface, l'agrégation, etc. Les résultats de la simulation ont été validés par comparaison aux résultats expérimentaux obtenus par combustion des carburants prévaporisés en flamme de diffusion à co-courant. Les objectifs étaient de simuler avec plus de précision les processus physiques de formation des suies ainsi que d'améliorer les prédictions des modèles de formation des suies. Les résultats montrent que leur modèle est capable de très bien prédire la taille des particules de suies ainsi que leur structure. Les fractions volumiques de suie sur les bords de la flamme sont de même raisonnablement bien reproduites. En revanche, pour ce qui est des prévisions de concentration des suies dans la région centrale de la flamme, une sous-estimation par un facteur allant jusqu'à cinq est observée. Un très bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux pour les concentrations des espèces en phase gazeuse et des profils de température est obtenu.

2.3 Conclusion

Les travaux effectués sur l'oxydation des hydrocarbures sont très nombreux et ont permis de mieux comprendre l'ensemble des mécanismes mis en jeu au cours de ce processus. Les études sur les carburants pour le transport terrestre et aérien sont de même très nombreuses, mais des disparités sont observées. En effet, de nombreux travaux de recherche se sont focalisés sur les carburants conventionnels dérivés du pétrole du type essences, diesels ou kérosènes. Le nombre d'études portant sur les carburants synthétiques (dont les biocarburants) est en revanche beaucoup moins important. En ce qui concerne le secteur aéronautique, dans la littérature on a recensé relativement peu d'études expérimentales et très peu de modèles cinétiques conçus pour simuler l'oxydation des carburants synthétiques dans les domaines de basses et de hautes températures. Les modèles existants nécessitent des améliorations et de nouvelles études expérimentales sont indispensables pour vérifier la validité des modèles.

Nos travaux porteront donc sur l'étude de l'oxydation de plusieurs kérosènes synthétiques d'origines et de compositions variées et de mélanges représentatifs, et le développement d'un modèle cinétique chimique détaillé, capable de simuler l'oxydation de ces carburants et leurs mélanges représentatifs dans diverses conditions.

Références bibliographiques

[1] J. M. Simmie

Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbons fuels, Progress in Energy and Combustion Science, 2003, vol. 29, pp. 599-634

[2] J. Zádor, C. A. Taatjes and R. X. Fernandes

Kinetics of elementary reactions in low-temperature autoignition chemistry, Progress in Energy and Combustion Science, 2011, vol. 37, pp. 371-421

[3] E. Corporan, M. J. DeWitt, V. Belovich, R. Pawlik, A. C. Lynch, J. R. Gord, T. R. Meyer

Emissions characteristics of a turbine engine and research combustor burning a Fischer-Fropsch Jet Fuel, Energy & Fuels, 2007, vol. 21, pp. 2615-2626

[4] R. H. Clark and J. F. Unsworth

Proceedings of the 2nd International Colloquium on Fuels, Tech. Akad. Esslingen, 20-21 January 1999, Ostfildern, Germany

[5] T. P. Gardner, S. S. Low and T. E. Kenney

Evaluation of some alternative diesel fuels for low emissions and improved fuel economy, SAE Technical, 2001, Paper 2001-01-0149

[6] D. Schmidt, V. W. Wong, W. H. Green, M. A. Weiss and J. B. Heywood

Review and Assessment of Fuel Effects and Research Needs in Clean Diesel Technology Proceedings of ASME-ICED Spring Technical Conference, 29-2 April-May 2001, vol. 36, pp. 23-37

[7] T. L. Alleman, R. L. McCormick and K. Vertin

Assessment of criteria pollutant emissions from liquid fuels derived from natural gas, Report NREL/TP-540-31873, 2002, National Renewable Energy Laboratories, Golden, CO

[8] M. Saffaripour, P. Zabeti , M. Kholghy, M. J. Thomson

An Experimental Comparison of the Sooting Behavior of Synthetic Jet Fuels, Energy & Fuels, 2011, vol. 25 (12), pp. 5584–5593

[9] M. S. P. Kahandalawa, M. J. Dewitt, E. Corporan and S. S. Sidhu

Ignition and Emission Characteristics of Surrogate and Practical Jet Fuels, Energy & Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3673-3679

[10] M. L. Huber, B. L. Smith, L. S. Ott, and T. J. Bruno

Surrogate Mixture Model for the Thermophysical Properties of Synthetic Aviation Fuel S-8: Explicit Application of the Advanced Distillation Curve, Energy & Fuels, 2008, vol. 22, pp. 1104-1114

[11] P. Gokulakrishnan, M. S. Klassen and R. J. Roby

Ignition Characteristics of a Fischer-Tropsch Synthetic Jet Fuel, Proceedings of ASME Turbo Expo, 2008, vol. 3, Pts A and B, pp. 921-929

[12] K. Kumar and C-J. Sung

A comparative experimental study of the auto-ignition characteristics of alternative and conventional jet fuel/oxidizer mixtures, Fuel, 2010, vol. 89, pp. 2853-2863

[13] H. Wang, M. A. Oehlschlaeger

Autoignition studies of conventional and Fischer–Tropsch jet fuels, Fuel, 2012, vol. 98, pp. 249–258

[14] X. Hui, K. Kumar, C. Sung, T. Edwards, D. Gardner

Experimental studies on the combustion characteristics of alternative jet fuels, Fuel, 2012, vol. 98, pp. 176–182

[15] S. Dooley, S. H. Won, S. Jahangirian, Y. Ju, F. L. Dryer, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger

The combustion kinetics of a synthetic paraffinic jet aviation fuel and a fundamentally formulated, experimentally validated surrogate fuel, Combustion and Flame, 2012, vol. 159, pp. 3014–3020

[16] A. Mzé-Ahmed, P. Dagaut, K. Hadj-Ali, G. Dayma, T. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia

M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, C. Naumann, U Riedel

Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study, Energy & Fuels, 2012, vol. 26, pp. 6070–6079

[17] P. Dagaut, F. Karsenty, G. Dayma, P. Diévart, K. Hadj-Ali, A. Mzé-Ahmed, M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, T. Kathrotia, T. Kick, C. Naumann, U Riedel, L. Thomas

Experimental and Detailed Kinetic Model for the Oxidation of a Gas to Liquid (GtL) Jet Fuel, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 835-847

[18] K. Kumar, C-J. Sung, X. Hui

Laminar flame speeds and extinction limits of conventional and alternative jet fuels, Fuel, 2010, vol. 90, pp. 1004-1011

[19] C. Ji, Y. L. Wang, F. N. Egolfopoulos

Flame Studies of Conventional and Alternative Jet Fuels, Journal of Propulsion and Power, 2011, vol. 27, No. 4, pp. 856-863

[20] C. Ji, E. Dames, Y. L. Wang, H. Wang, F. N. Egolfopoulos

Propagation and extinction of premixed C_5 –C_{12} n-alkane flames, Combustion and Flame, 2010, vol. 157, pp. 277-287

[21] Th. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia, J. Marquetand, M. Braun-Unkhoff, C. Naumann, U. Riedel

An experimental and modeling study of burning velocities of possible future synthetic jet fuels, Energy, 2012, vol. 43, pp. 111-123

[22] C. Togbé, P. Dagaut,A. Mzé-Ahmed, P. Dievart, F. Halter, F. Foucher

Experimental and detailed kinetic modeling study of 1-hexanol oxidation in a pressurized jet-stirred reactor and a combustion bomb, Energy & Fuels, 2010, vol. 24, pp. 5859-5875

[23] A. Mzé-Ahmed, K. Hadj-Ali, P. Dievart, P. Dagaut

Kinetics of oxidation of a synthetic jet fuel in a jet-stirred reactor: experimental and modeling study, Energy & Fuels, 2010, vol. 24, pp. 4904-4911

[24] C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, A. Modak, E. Meeks, Y. L. Wang, Q. Feng, T. T. Tsotsis

Detailed chemical kinetic mechanism for surrogates of alternative jet fuels, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 434-445

[25] P. Dagaut, A. El Bakali and A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate mode fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

[26] P. Dagaut, M. Cathonnet

The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling, Progress in Energy and Combustion Science, 2006, vol. 32, pp. 48 – 92

[27] P. Dagaut and S. Gail

Kinetics of gas turbine liquid fuels combustion: Jet-A1 and biokerosene, Proceedings of the ASME Turbo Expo, 2007, vol. 2

[28] P. Dagaut and S. Gail

Chemical kinetic study of the effect of a biofuel additive on jet-A1 combustion, The Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3992-4000

[29] A. Mzé Ahmed

Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants-modèles - Formation de polluants, Thèse, Université d'Orléans 2011

[30] C. K. Westbrook

A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane, Combustion and Flame, 2009, vol. 156, pp. 181-199

[31] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook

A comprehensive modelling study of iso-octane oxidation, Combustion and Flame, 2002, vol. 129, pp. 253-280

[32] P. Dagaut, P. Glarborg and M. U. Alzueta

The oxidation of hydrogen cyanide and related chemistry, Progress in Energy and Combustion Science, 2008, vol. 34, pp. 1-46

[33] C. L. Rasmussen, A. E. Rasmussen and P. Glarborg

Sensitizing effects of NO_x on CH_4 oxidation at high pressure, Combustion and Flame, 2008, vol. 154, pp. 529-545

[34] J. Appel, H. Bockhorn and M. Frenklach

Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C_2 hydrocarbons, Combustion and Flame, 2000, vol. 121, pp. 122-136

[35] M. S. Skjøth-Rasmussen, P. Glarborg, M. Østberg, J. T. Johannessen, H. Livbjerg A. D. Jensen and T. S. Christensen

Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and soot in fuel-rich oxidation of methane in a laminar flow reactor, Combustion and Flame, 2004, vol. 136, pp. 91-128

[36] H. R. Zhang, E. G. Eddings, A. F. Sarofim and C. K. Westbrook

Fuel dependence of benzene pathways, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 377-385

[37] D. F. Davidson, M. A. Oehlschlaeger, J. T. Herbon and R. K. Hanson

Shock tube measurements of iso-octane ignition times OH concentration time histories, Proceedings of the Combustion Institute, 2002, vol. 29, pp. 1295-1301

[38] D. J. Vermeer, J. W. Meyer and A. K. Oppenheim

Auto-ignition of hydrocarbons behind reflected shock waves, Combustion and Flame, 1972, vol. 18, pp. 327-336

[39] U. Pfahl, K. Fieweger and G. Adomeit

Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures under Engine Conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 1996, vol. 26, pp. 781-789

[40] S. S. Vasu, D. F. Davidson, Z. Hong, V. Vasudevan and R. K. Hanson

n-Dodecane oxidation at high-pressures: Measurements of ignition delay times and OH concentration time-histories, Proceedings on the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 173-180

[41] T. Bieleveld, A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, E. Ranzi, U. Niemann K. Seshadri

Experimental and kinetic modelling study of combustion of gasoline, its surrogate and components in laminar non-premixed flows, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 493-500

[42] K. Kumar, C-J. Sung

Laminar flame speeds and extinction limits of preheated n-decane/O_2/N_2 and n-dodecane/O_2/N_2 mixtures, Combustion and Flame, 2007, vol. 151, pp. 209-224

[43] C. Ji, E. Dames, Y. L. Wang, H. Wang and F. N. Egolfopoulos

Propagation and extinction of premixed C_5 –C_{12} n-alkane flames, Combustion and Flame, 2010, vol. 157, pp. 277-287

[44] C. Ji, X. Q. You, A. T. Holley, Y. L. Wang, F. N. Egolfopoulos and H. Wang

Propagation and Extinction of n-Dodecane/Air Flames: Experiments and Modeling, Poster paper presented at the 32th International Symposium on Combustion, 2007, Montreal, Canada

[45] S. G. Davis and C. K. Law

Laminar flame speeds and oxidation kinetics of iso-octane-air and n-heptane-air Flames, Proceedings of the Combustion Institute, 1998, vol. 27, pp. 521-527

[46] Y. Huang, C. J. Sung and J. A. Eng

Laminar flame speeds of primary reference fuels and reformer gas mixtures, Combustion and Flame, 2004, vol. 139, pp. 239-251

[47] E. Catalanotti, K. J. Hughes, M. Pourkashanian, C. W. Wilson

Development of a Chemical Reaction Mechanism for Alternative Aviation Fuels, Energy & Fuels, 2011, vol. 25, pp. 1465-1473

[48] P.Dagaut, S. Gaïl, M. Sahasrabudhe

Rapeseed oil methyl ester oxidation over exended ranges of pressure, temperature, and equivalence ratio: Experimental and modelling kinetic study, Proceedings of the Combustion Institute, 2007, vol. 31, pp. 2955-2961

[49] P. Dagaut, M. Reuillon, M. Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 2. Mixtures of n-heptane and iso-octane, Combustion Science and Technology, 1994, vol. 95, pp. 233-260

[50] S. Dooley, S. Hee Won, M. Chaos, J. Heyne, Y. Ju, F. L. Dryer, K. Kumar, C-J. Sung, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger, R. J. Santoro, T. A. Litzinger

A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties, Combustion and Flame 2010, vol. 157, pp. 2333-2339

[51] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook and H. J. Curran

Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 2011, vol. 33, pp. 193-200

[52] E. Ranzi, A. Frassoldati, S. Granata, T. Faravelli

A wide range kinetic modeling study of pyrolysis, oxidation and combustion of heavy n-alkanes, Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005, vol. 44, pp. 5170-5183

[53] A. Saffaripour, A. Veshkini, M. Kholghy, M. J. Thomson

Experimental investigation and detailed modeling of soot aggregate formation and size distribution in laminar coflow diffusion flames of Jet A-1, a synthetic kerosene, and n-decane, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 848-463

Chapitre III

Dispositif expérimental

3 Dispositif expérimental 87

3.1 Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) 87

3.1.1 Principe du réacteur auto-agité 87

3.1.2 Description du réacteur auto-agité par jets gazeux 88

3.1.3 Calculs des débits gazeux 91

3.1.4 Prélèvements et échantillonnage des gaz de combustion 92

3.2 Techniques d'analyse des gaz de combustion 93

3.2.1 Spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier 93

3.2.1.1 Principe d'un spectromètre d'absorption IRTF 93

3.2.1.2 Principe de l'analyse quantitative par infrarouge 94

3.2.1.3 Construction de la méthode de dosage en IRTF 95

3.2.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse 96

3.2.2.1 Principe de la chromatographie en phase gazeuse 96

3.2.2.2 Analyse des composés hydrocarbonés 98

3.2.2.3 Analyse de l'oxygène et de l'hydrogène 98

3.3 Incertitude sur les résultats 98

3.4 Conclusion 100

Références bibliographiques 101

3 Dispositif expérimental

Un certain nombre de dispositifs expérimentaux existent pour étudier l'oxydation des hydrocarbures. Nous distinguons les brûleurs tels que les brûleurs à flamme de prémélange , les brûleurs à flamme de diffusion ou les brûleurs à contre courant , les systèmes à compression tels que les tubes à choc ou les machines à compression rapide et les réacteurs tels que les réacteurs fermés, à écoulement tubulaire ou parfaitement agité. Chaque dispositif a ses propres caractéristiques, avantages, inconvénients et limitations. Pour cette étude, le dispositif expérimental utilisé est le réacteur auto-agité par jets gazeux (Jet-Stirred Reactor, JSR). Il permet de travailler sur une large gamme de conditions expérimentales (température, pression, richesse, temps de passage) et permet la mesure de la concentration des réactifs, intermédiaires stables et produits de combustion au cœur de la zone réactionnelle. Il permet enfin de concentrer les efforts sur la cinétique chimique des systèmes étudiés en pouvant être assimilé à un réacteur idéal.

3.1 Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR)

3.1.1 Principe du réacteur auto-agité

Le réacteur auto-agité par jets gazeux permet d'étudier les mécanismes d'oxydation d'un grand nombre d'hydrocarbures dans un large domaine de température, de pression, de richesse et de temps de passage (Tableau III.1).

Tableau III.1 : Conditions accessibles en JSR

Pression (atm)	Richesse	% carburant	Température (K)	τ (s)
1 - 10	0 - ∞	0,005 - 1	300 - 1400	0,02 - 5

Dans un réacteur auto-agité, la composition dans l'ensemble de l'enceinte réactionnelle est considérée comme parfaitement homogène à tout instant. Cette condition est respectée lorsque le temps de mélange des réactifs et le temps nécessaire à une molécule pour

parcourir la distance séparant deux points quelconque du réacteur sont infiniment faibles devant le temps de passage τ, défini comme le rapport du volume du réacteur [en cm^3] par le débit volumique [en $cm^3.s^{-1}$].

$$\tau = \frac{V_r}{D_e}$$

Ces conditions ainsi respectées, les gaz de combustion prélevés en sortie du réacteur possèdent alors la même composition instantanée que le milieu réactionnel, et les transformations ayant lieu dans le volume réactionnel sont uniquement régies par des processus chimiques.

A la différence du temps de passage qui peut précisément être calculé dans le cas de réacteurs comme celui-ci, le temps de séjour peux théoriquement prendre une valeur quelconque. Or dans ces conditions le temps de séjour moyen est équivalent au temps de passage.

3.1.2 Description du réacteur auto-agité par jets gazeux

Pour cette étude nous avons utilisé un réacteur auto-agité par jets gazeux, ou Jet Stirred Reactor, capable de travailler jusqu'à des températures d'environ 1400 K et une pression de 10 atm.

Ce dispositif (Figure III.1) a été mis au point par Dagaut *et al.* [1] en 1986 d'après les recommandations des chercheurs de l'institut Polytechnique de Lorraine Matras, David et Villermaux [2,3], qui ont défini les conditions de réalisation et de fonctionnement d'un réacteur auto-agité par jets gazeux. Ce réacteur, installé à l'ICARE, est parfaitement agité pour des temps de passage allant de quelques millisecondes à quelques secondes.

Le réacteur, présenté en figure III.1, est une sphère d'un volume de 42 cm^3, en silice fondue (quartz), afin de limiter les réactions aux parois. Quatre injecteurs d'un diamètre interne de 1 mm sont situés dans la demi-sphère haute du réacteur. Ces injecteurs sont opposés deux à deux, ce qui assure une bonne homogénéisation du mélange réactionnel. De plus, la disposition pyramidale de ces injecteurs permet le déplacement d'un ensemble sonde de prélèvement-thermocouple (Figures III.2 et III.3) le long de l'axe vertical, permettant ainsi

de vérifier l'homogénéité en concentration et en température du mélange gazeux. Le réacteur est placé dans un four constitué de deux éléments chauffants permettant de chauffer la zone réactionnelle et ainsi d'étudier la cinétique des réactions à la température souhaitée. Le réacteur est isolé thermiquement à l'aide d'une laine minérale isolante (Kerlane). Cet ensemble réacteur-four-isolant est lui-même placé dans une enceinte métallique pressurisable permettant de travailler jusqu'à une pression de 10 atmosphères. L'équilibre en pression entre l'intérieur et l'extérieur du réacteur est assuré par une fuite des gaz brûlés dans l'enceinte. Le système de prélèvement est équipé d'une sonde sonique mobile couplée à un thermocouple fin Pt/Pt-Rh 10 % qui est lui-même inséré à l'intérieur d'une fine gaine de quartz pour éviter les réactions catalytiques en surface. Au sein de cette gaine les fils sont électriquement isolés à l'aide d'un capillaire en quartz. L'incertitude mesurée sur la température ne dépasse généralement pas 5 K.



Figure III.1 : Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR)

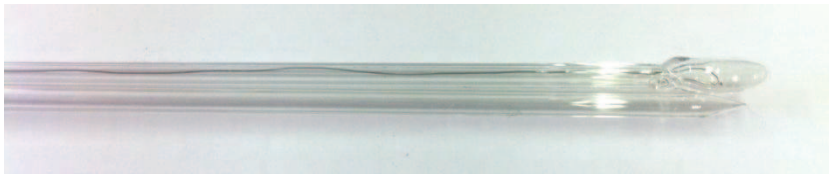


Figure III.2 : Ensemble sonde de prélèvement-thermocouple

Le carburant étudié est initialement sous forme liquide. Il est acheminé grâce à une pompe HPLC (High Performance Liquid Chromatography) jusqu'à un ensemble atomiseur-vaporisateur. Il est, à ce niveau, dans un premier temps atomisé (passage sous forme de brouillard) grâce à un flux d'azote que l'on qualifie d'auxiliaire. Ce mélange est ensuite vaporisé par chauffage de la chambre de vaporisation. Ce flux gazeux constitué d'azote et de carburant est ensuite amené jusqu'à l'entrée du réacteur par l'intermédiaire d'un capillaire en quartz. A ce niveau, le flux gazeux azote-carburant va rencontrer un flux d'azote (principal) et d'oxygène acheminé à l'extérieur du capillaire afin d'éviter tout contact entre le combustible et le comburant avant la zone de mélange en amont du réacteur. Les flux gazeux d'azote et d'oxygène sont préchauffés et régulés à l'aide de débitmètres massiques.

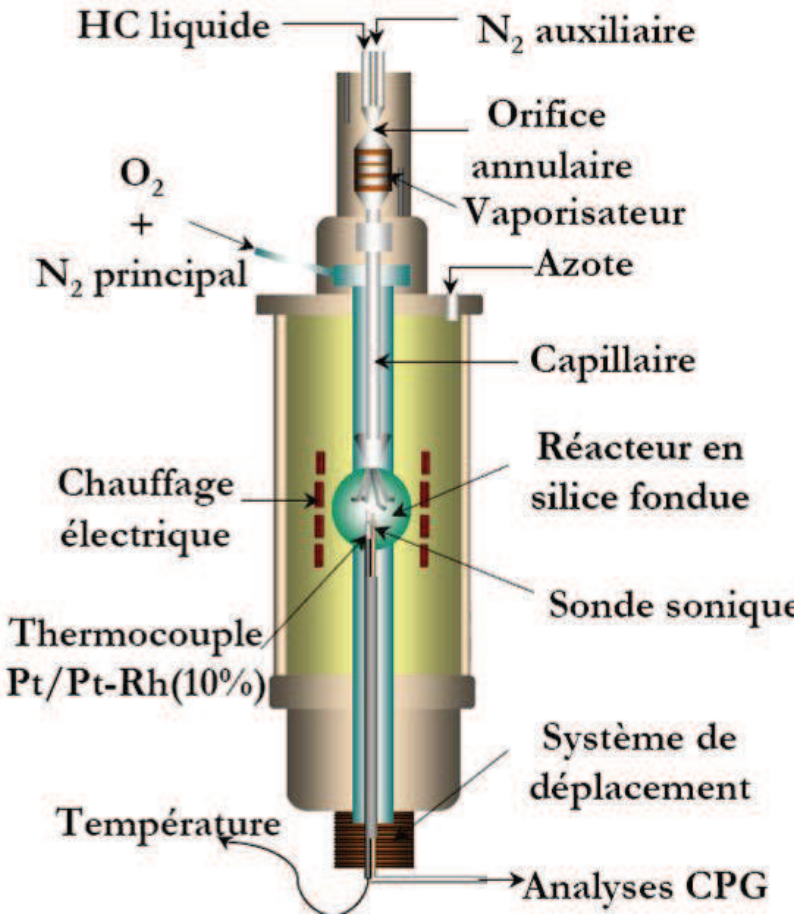


Figure III.3 : Ensemble du dispositif expérimental

3.1.3 Calculs des débits gazeux

Le réacteur auto-agité permet de travailler dans deux différentes configurations :

- à température constante et temps de passage variable
- à temps de passage constant et température variable

Quelle que soit la configuration choisie, il est impératif d'avoir calculé les débits volumiques de tous les différents flux (azote et oxygène gazeux et carburant liquide). Ils sont calculés à partir du temps de séjour moyen des gaz au sein du réacteur auto-agité. Ce temps de séjour moyen noté $\bar{t}_s$ aussi appelé temps de passage (τ) est défini comme constant au cours de nos expériences. L'expression du temps de séjour moyen est la suivante [4]:

$$\bar{t}_s = \left(\frac{V_r}{D_e}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)$$

Avec $\bar{t}_s$: temps de séjour moyen des gaz dans le réacteur [s]

D_e : débit total à l'entrée du réacteur [$cm^3.s^{-1}$]

V_r volume du réacteur [cm^3]

T température de travail [K]

T_0 température ambiante [K]

P pression de travail [atm]

P_0 pression ambiante [atm]

Il est ainsi possible de calculer les débits D_i gazeux de chaque constituant i à partir de cette équation, la température et la pression étant fixés par l'expérimentateur et la composition du mélange étudié étant connue. L'expression est la suivante :

$$D_i = X_i \times D_e = X_i\left(\frac{V_r}{\bar{t}_s}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)$$

Avec X_i représentant la fraction molaire initiale des réactifs à l'entrée du réacteur.

L'hydrocarbure étant injecté sous forme liquide grâce à la pompe HPLC, il est nécessaire de déterminer son débit à partir du débit gazeux. La relation s'écrit :

$$D_{HC(l)} = X_{HC,i} \times \left(\frac{V_r}{\bar{t}_s} \right) \left(\frac{M_{HC} \times P}{\rho_{HC} \times R \times T} \right)$$

Avec M_{HC} la masse molaire de l'hydrocarbure injecté en g.mol^{-1} et ρ_{HC} la masse volumique en g.cm^{-3}.

3.1.4 Prélèvements et échantillonnage des gaz de combustion

Le prélèvement des gaz de combustion se fait lorsque que le système se trouve dans un état stationnaire. Cet état est atteint lorsque la zone réactionnelle est considérée comme parfaitement homogène au sein du réacteur après avoir réglé tous les débits et atteint la température et la pression souhaitée. L'échantillonnage est effectué grâce à une sonde sonique mobile autorisant des prélèvements selon l'axe vertical du réacteur. Cette sonde est reliée à une rampe de prélèvement via une ligne de transfert chauffée. La totalité de ce circuit est maintenu sous vide sans pour autant perturber les réactions dans le réacteur. L'échantillonnage est effectué à une pression d'environ 40 torr ce qui permet d'assurer un figeage des réactions, garantissant que l'échantillon prélevé soit représentatif de la composition des gaz dans la zone réactionnelle.

L'échantillon gazeux prélevé est alors soit injecté directement dans un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) et un chromatographe en phase gazeuse permettant une analyse en ligne des gaz de combustion, soit stocké dans des ballons en Pyrex à température ambiante pour être analysé ultérieurement (Figure III.4).

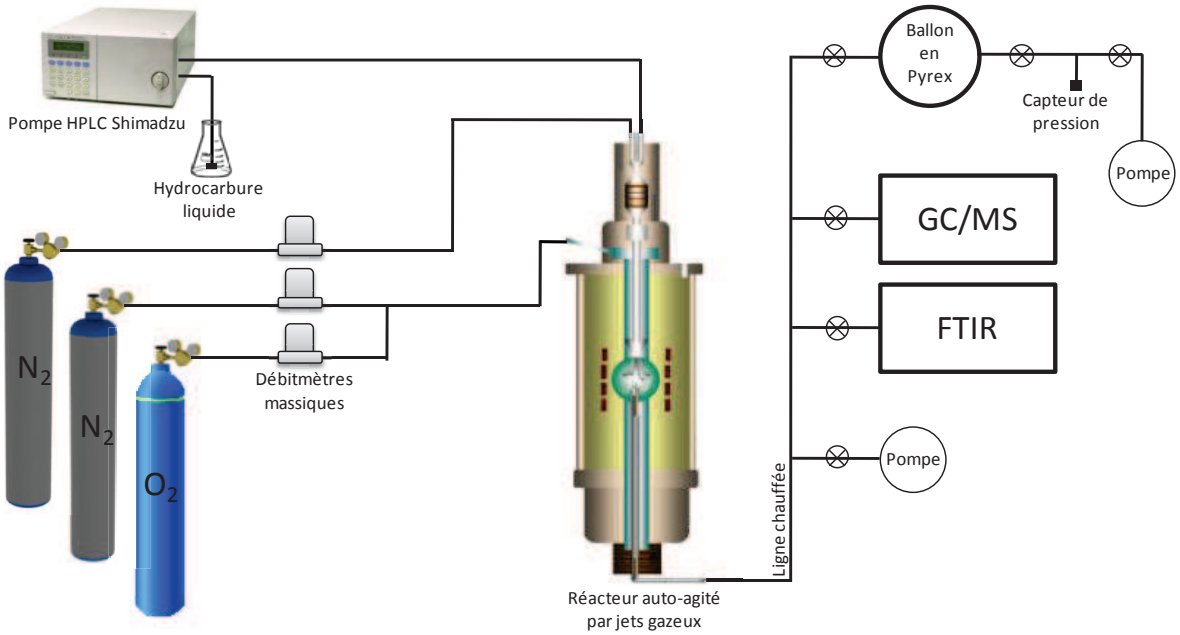


Figure III.4 : Vue d'ensemble du dispositif expérimental

3.2 Techniques d'analyse des gaz de combustion

Plusieurs méthodes d'analyse ont été utilisées pour analyser les gaz de combustion de façon à identifier et quantifier le plus grand nombre d'espèces chimique possible. En effet, nous avons utilisé un spectromètre d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) et des chromatographes en phase gazeuse (CPG) couplés avec différents détecteurs. Afin d'utiliser au mieux ces techniques, il faut dans un premier temps calibrer les instruments (IRTF, CPG) par des étalonnages externes.

3.2.1 Spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier

3.2.1.1 Principe d'un spectromètre d'absorption IRTF

L'analyse par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier est la première technique utilisée. Celle-ci est basée sur l'absorption du rayonnement infrarouge (entre 4000 cm^{-1} et 400 cm^{-1}) par les gaz à analyser. Elle permet via la détection des niveaux

énergétiques roto-vibrationnels des molécules, d'identifier et de quantifier des espèces telles que le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, la vapeur d'eau, le formaldéhyde et quelques hydrocarbures légers tels que le méthane, l'acétylène et l'éthylène présents dans les gaz. L'échantillon est donc prélevé à l'aide d'une sonde sonique puis introduit dans une cellule analytique (200 mbar) ayant un chemin optique de 10 mètres, via une ligne chauffée à 200°C pour éviter toute condensation des hydrocarbures lourds.

La fréquence des radiations absorbées dépend de la fréquence propre de vibration de la molécule. L'intensité d'absorption dépend de la variation du moment dipolaire. Par conséquent, seules les liaisons polarisées (ayant un moment dipolaire) absorbent dans l'infrarouge. Les molécules diatomiques symétriques (comme H_2, O_2, N_2…) ne présentent pas de moment dipolaire. Ces molécules ne peuvent donc pas être identifiées ni détectées par cette technique.

Le spectromètre utilisé lors de ces expériences est un spectromètre d'absorption IRTF de modèle Nexus Thermo Nicolet avec une résolution de 0,5 cm^{-1}.

3.2.1.2 Principe de l'analyse quantitative par infrarouge

L'analyse quantitative est basée sur la loi de Beer-Lambert qui défini l'absorption lumineuse par une substance dans un quelconque domaine spectroscopique. A l'aide de la mesure des intensités I et I_0 on obtient l'absorbance A_λ. I correspond à l'intensité infrarouge à la longueur d'onde λ dans l'échantillon à analyser. I_0 correspond à l'intensité infrarouge à la longueur d'onde λ lorsque la cellule d'analyse est sous vide.

$$A_\lambda = -\log_{10}\left(\frac{I}{I_0}\right) = \varepsilon_\lambda \times l \times C$$

Avec ε_λ coefficient d'extinction molaire du composé a la longueur d'onde λ

l longueur du chemin optique dans l'échantillon à analyser (10 m)

C concentration du composé

La concentration d'un composé peut ainsi être calculée grâce à la relation de Beer-Lambert par la mesure expérimentale de l'absorbance à une longueur d'onde λ. Cependant il

est impératif d'établir une méthode d'analyse permettant l'étalonnage du dispositif par la mesure de l'absorbance de plusieurs étalons à différentes concentrations (A=f(C)).

3.2.1.3 Construction de la méthode de dosage en IRTF

De façon à identifier et quantifier les espèces chimiques présentes dans les gaz de combustion en sortie du réacteur nous devons donc établir une méthode d'analyse. Cette méthode s'opère en plusieurs étapes énumérées ci-dessous :

- Acquisition d'un spectre de référence pour chaque composé à analyser obtenu à partir d'un étalon (Figure III.5)
- Localisation des différentes bandes d'absorption caractéristiques de chaque composé.
- Identification et signalisation des zones d'interférences entre composés (zones communes d'absorption entre deux ou plusieurs espèces). Le tableau III.2 présente les régions d'analyse (S) et d'interférence (I) pour chaque espèce dosée.
- Etablissement d'une courbe d'étalonnage à la pression et à la température de prélèvement pour chaque composé à analyser.

Tableau III.2 : Matrice précisant les régions d'analyse (S) des composés et leurs interférences (I)

	Espèces chimiques analysées										
	H_2O	CO_2	CO	CH_2O	MEOH	CH_4	C_2H_2	C_2H_4	C_2H_6	C_3H_6	MEHEP
A (cm^{-1})											
910.0 - 914.0	-	-	-	-	-	-	-	I	-	S	I
940.0 - 960.0	-	-	-	-	I	-	-	S	-	I	-
1030.0 - 1035.0	-	-	-	-	S	-	-	I	-	I	I
1710.0 - 1800.0	I	-	-	I	-	-	-	-	-	-	S
1741.0 - 1747.0	I	-	-	S	-	-	-	-	-	-	I
2040.0 - 2140.0	-	-	S	-	-	-	-	-	-	-	-
2350.0 - 2390.0	-	S	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2992.0 - 3001.0	-	-	-	I	I	I	-	I	S	-	-
3002. - 3019.0	-	-	-	I	I	S	-	I	I	I	I
3210.0 - 3400.0	-	-	-	-	-	I	S	I	-	-	I
3800.0 - 3875.0	S	-	-	-	I	-	-	-	-	-	-

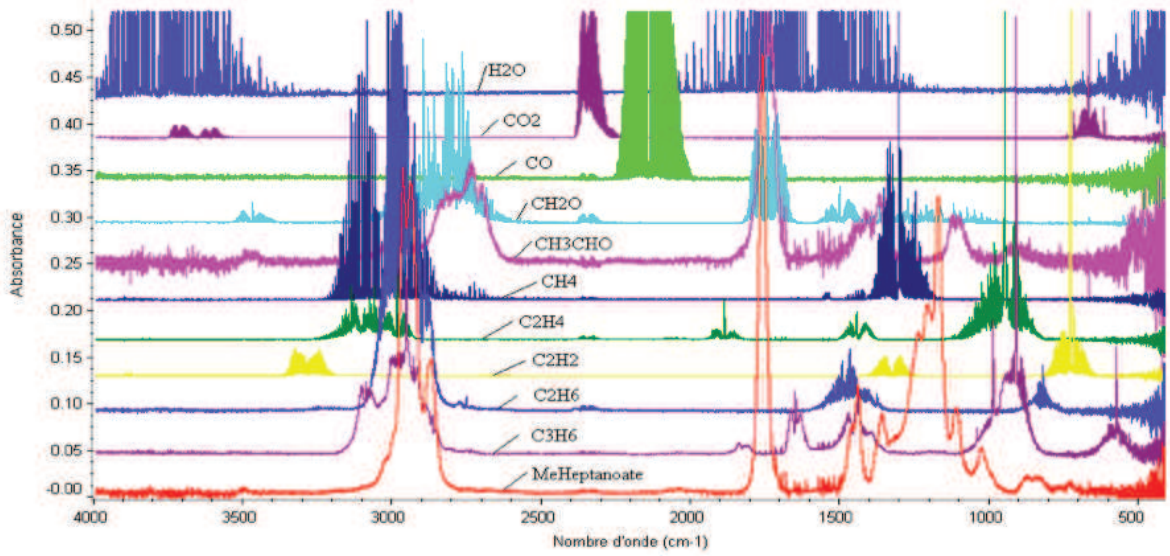


Figure III.5 : Acquisition du spectre de référence pour chaque composé à analyser

Les principales espèces présentes dans les gaz de combustion en sortie du réacteur sont donc visibles dans cette gamme de nombre d'onde (4000-500 cm^{-1}). Nous pouvons ainsi, à l'aide de cette méthode, connaître la contribution de chaque espèce et par conséquent leur concentration par rapport à des spectres étalons.

3.2.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse

La deuxième technique d'analyse des gaz de combustion utilisée est la chromatographie en phase gazeuse. Différents chromatographes équipés de différentes colonnes et détecteurs sont utilisés. Ces chromatographes permettent ainsi d'identifier et de quantifier une large gamme d'espèces.

3.2.2.1 Principe de la chromatographie en phase gazeuse

La chromatographie en phase gazeuse est une méthode physico-chimique qui permet la séparation des différents constituants d'un mélange. Après avoir été stockés dans des ballons en Pyrex à une pression avoisinant les 40 torrs, l'échantillon est injecté à l'entrée de la colonne (phase stationnaire) puis conduit tout au long de celle-ci grâce à un gaz vecteur (phase mobile). Les éléments présents dans cet échantillon sont séparés selon leur affinité avec la phase stationnaire puis sortent de la colonne. Le temps caractéristique nécessaire aux

différents constituants du mélange pour traverser la colonne est appelé temps de rétention et dépend des conditions de température appliquées lors de l'analyse. Ce système est précédé d'un système d'injection des gaz (boucle d'injection) et suivi d'un détecteur. Il est à noter que les échantillons sont comprimés jusqu'à une pression de 750 torr à l'aide d'un piston thermostaté avant toute injection dans les chromatographes. Cela a pour but d'améliorer la détection des espèces présentes dans les différents ballons lors des analyses.

La quantification des espèces détectées nécessite un étalonnage préalable effectué à partir d'étalons gazeux (commerciaux ou préparés manuellement) pour les composés majoritaires (Figure III.6). La réponse des détecteurs couplés aux chromatographes étant linéaire, il est possible de calculer le coefficient de chaque étalon en reliant l'aire des pics à la concentration connue de l'espèce correspondante. Les coefficients de réponse des composés considérés comme minoritaires sont calculés à partir des coefficients de réponse des composés ayant une structure chimique voisine ou à partir de la règle du nombre de carbone effectif (ECN) [5]. Le coefficient de réponse est spécifique à chaque espèce.

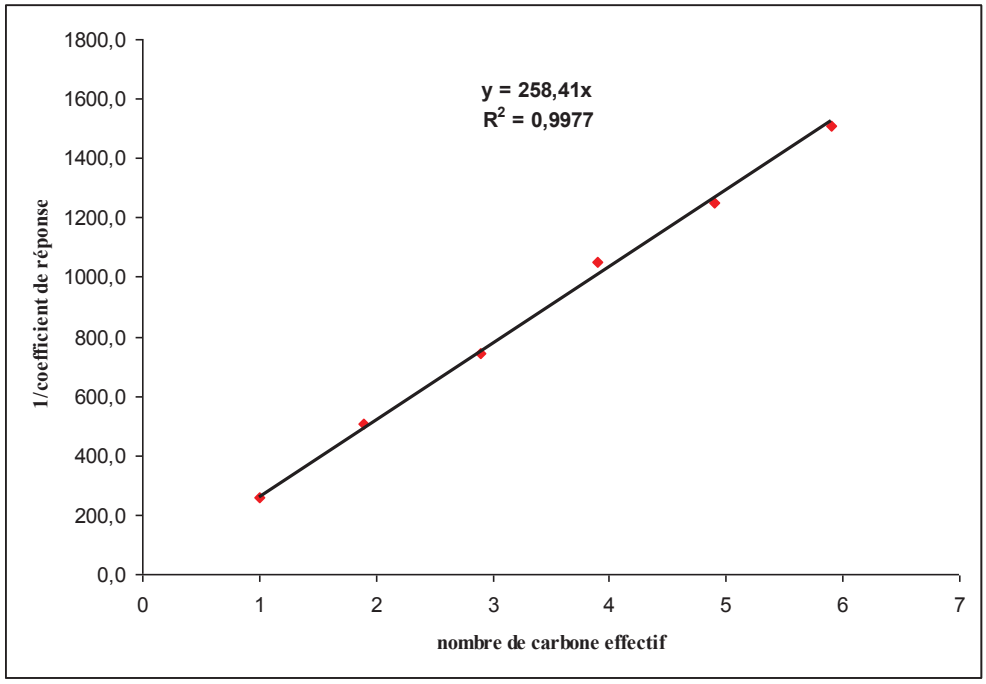


Figure III.6 : Exemple de courbe d'étalonnage d'alcanes de C_1 à C_6 par (CPG/DB-624)

3.2.2.2 Analyse des composés hydrocarbonés

Comme nous l'avons vu précédemment, plusieurs chromatographes en phase gazeuse sont utilisés lors des analyses. Deux d'entre eux sont équipés d'un détecteur à ionisation de flamme (FID) et de colonnes différentes.

Les hydrocarbures légers contenant un nombre de d'atome de carbone compris entre 1 et 6 sont analysés sur le premier d'entre eux. Il est équipé d'une colonne capillaire en alumine saturée en chlorure de potassium KCl (Plot Al_2O_3/KCl).

Un autre chromatographe équipé d'une colonne capillaire DB-624 permet d'analyser une large variété d'hydrocarbures, de composés oxygénés et de produits lourds condensables. De façon à identifier le maximum de ces composés présents dans les gaz de combustion, ce même chromatographe est aussi couplé à un spectromètre de masse SM (quadrupôle Shimadzu QP2010SE). Cet appareil est directement relié à la ligne de prélèvement des gaz de réactions et permet donc de réaliser une analyse en ligne.

3.2.2.3 Analyse de l'oxygène et de l'hydrogène

L'oxygène et l'hydrogène sont dosés au moyen d'un troisième chromatographe en phase gazeuse équipé d'une colonne Carboplot P7 et d'un détecteur à conductibilité thermique. Contrairement aux autres chromatographes utilisés dans cette étude, le gaz vecteur utilisé pour la mesure de l'hydrogène est l'azote.

3.3 Incertitude sur les résultats

Les données expérimentales obtenues en réacteur parfaitement agité sont destinées à être utilisées pour la validation de modèles cinétiques détaillés. Il est donc impératif de connaître l'incertitude associée à ces résultats afin de pouvoir relativiser la précision des modèles. Dans notre cas, les principales sources pouvant être à l'origine des incertitudes sur les données expérimentales sont le dispositif expérimental et le système analytique.

En considérant la totalité du dispositif expérimental, on peut remarquer que la composition réelle du mélange introduit dans le réacteur est dépendante des débits imposés en azote, oxygène et hydrocarbure. Ainsi, malgré l'étalonnage des débitmètres (coefficient de corrélation des courbes d'étalonnage supérieur 0,995) et la précision des dispositifs de contrôle, il subsiste une erreur sur les débits théoriquement nécessaires pour obtenir la composition initialement souhaitée. Cette erreur est liée à la conversion des débits en tension de consigne. Sur la figure III.7 sont représentées des courbes d'étalonnage des débitmètres d'O_2 et de N_2. D'autre part, nous estimons la variation de température au sein du réacteur de l'ordre de 5 K (mesuré à l'aide du thermocouple couplé à la sonde de prélèvement et rendu possible grâce au déplacement vertical de celle-ci). En effet, malgré toutes les précautions prises, il est difficile d'assurer une température parfaitement homogène dans l'ensemble du milieu réactionnel. Ces erreurs sur la température et la composition du mélange réactionnel ont un impact sur la composition des produits formés pendant le processus d'oxydation.

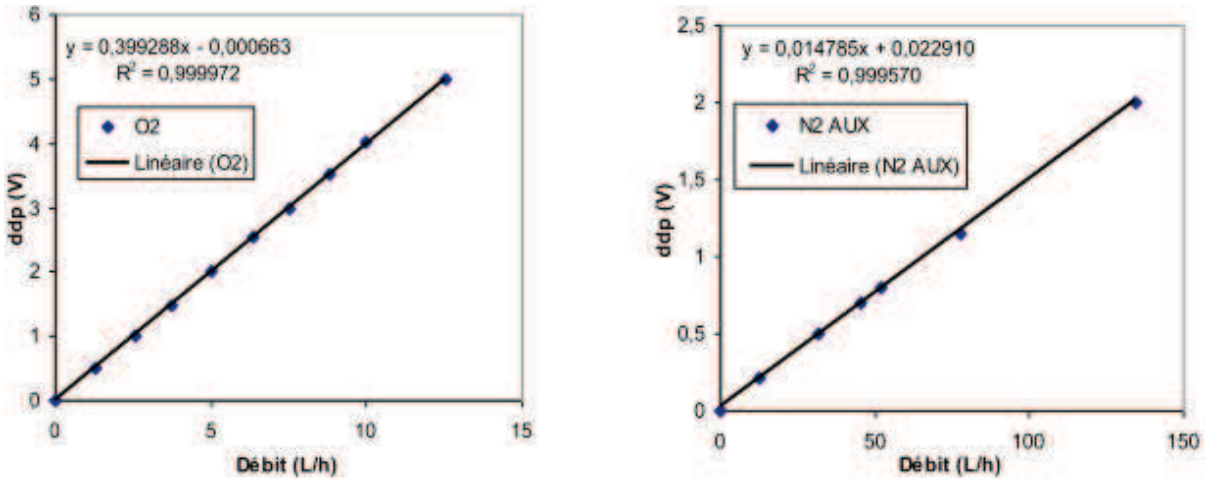


Figure III.7 : Exemple de courbe d'étalonnage des débitmètres

En ce qui concerne le système analytique, les sources d'erreurs peuvent venir de la pression d'injection des gaz (0,2%) ou de la résolution des pics chromatographiques lors des analyses (mauvaise séparation conduisant à une intégration imprécise). Cependant l'erreur principale provient de la détermination des coefficients de réponse. En effet, pour les réactifs, produits et espèces communes à l'ensemble des hydrocarbures, les coefficients de réponse ont été obtenus par étalonnage externe. Or pour les autres composés, les coefficients ont été obtenus par des corrélations (ECN) entre hydrocarbures, induisant des incertitudes sur la quantification des produits gazeux prélevés à la sortie du réacteur.

En tenant compte de tous ces paramètres, on peut estimer que l'incertitude globale est égale au maximum à 15%.

3.4 Conclusion

Le réacteur auto-agité par jets gazeux est un outil efficace pour l'étude de la cinétique de réaction dans le domaine de la combustion. Il permet de travailler dans diverses configurations (température ou temps de passage constant) et dans un large domaine de pression, température et richesse. Il permet aussi d'obtenir un mélange gazeux uniforme en pression, température et composition et donc de s'assurer que les échantillons prélevés sont représentatifs du milieu réactionnel.

La composition de ces échantillons, rendu non réactifs par une rapide chute de pression, peut ensuite être déterminée à l'aide de différentes techniques analytiques comme la chromatographie en phase gazeuse et la spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier. Les résultats obtenus pourront ensuite être utilisés pour la validation de modèles cinétiques adaptés aux différents composés étudiés.

Références bibliographiques

[1] P. Dagaut, M. Cathonnet, J-P. Rouan, R. Foulatier, A. Quilgars, J-C. Boettner, F. Gaillard and H. James

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, 1986, vol. 19, pp. 207-209

[2] D. Matras et J. Villermaux

Un réacteur continu parfaitement agité par jets gazeux pour l'étude de la cinétique de réactions rapides, Chemical Engineering Science, 1973 vol. 28, 129

[3] R. David et D. Matras

Règles de construction et d'extrapolation des réacteurs auto-agités par jets gazeux Canadian Journal of Chemical Engineering, 1975, vol. 53, pp. 297-300

[4] J. Villermaux

Réacteurs chimiques, Techniques de l'ingénieur, 1994

[5] J. Tranchant

Manuel de chromatographie en phase gazeuse, Masson, 1982

Chapitre IV

Modélisation

4 Modélisation.....105

4.1 Le logiciel CHEMKIN.....106

4.1.1 Le mécanisme réactionnel.....107

4.1.2 Les données thermodynamiques.....108

4.1.3 Le code de calcul Perfectly Stirred Reactor (PSR).....109

4.2 Développement d'un modèle cinétique.....112

4.2.1 Sous-mécanismes C_0-C_4.....113

4.2.2 Structure et développement du sous-mécanisme d'un hydrocarbure lourd.....114

4.2.3 Mécanisme d'oxydation du kérosène.....116

4.2.4 Mécanisme d'oxydation de kérosènes de synthèse.....117

4.2.4.1 Mélange modèle d'oxydation du CtL Sasol.....122

4.2.4.2 Mélange modèle d'oxydation du GtL Shell.....125

4.2.4.3 Mélange modèle d'oxydation du SPK (IFP).....128

4.3 Conclusion.....130

Références bibliographiques.....131

4 Modélisation

De nos jours, la modélisation prend une place de plus en plus importante dans l'industrie et les laboratoires de recherche. Elle permet en effet une meilleure compréhension des systèmes et une limitation des expériences qui sont généralement coûteuses.

Dans notre cas, elle nous permet d'avoir une meilleure connaissance des mécanismes de combustion des kérosènes reformulés comme alternative aux kérosènes conventionnels. Par conséquent, la modélisation est un outil indispensable pour le développement de ces nouveaux carburants. L'évolution de la technologie a ainsi permis à la modélisation d'avoir une place primordiale dans la conception des carburants reformulés tels que les biocarburants ou les carburants de synthèse destinés à l'aéronautique. Cependant, les mécanismes réactionnels des kérosènes conventionnels ne permettent généralement pas de modéliser l'oxydation des kérosènes reformulés en raison de leur différence de composition. Il est donc nécessaire de développer un modèle cinétique pour l'oxydation de ces nouveaux carburéacteurs.

La modélisation rend ainsi possible la validation des résultats obtenus expérimentalement et contribue à une meilleure compréhension de la chimie de combustion de ces carburants et des mécanismes réactionnels mis en jeu.

Pour modéliser nos résultats obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux, nous avons utilisé le package « CHEMKIN ». Ce chapitre présente les outils utilisés et les règles de construction du mécanisme cinétique.

4.1 Le logiciel CHEMKIN

Dans le but de mieux comprendre et de prédire la cinétique de combustion des différents carburants, on modélise les réactions chimiques se déroulant dans le réacteur auto-agité au moyen du programme PSR (Glarborg *et al.*) [1], contenu dans la bibliothèque du logiciel CHEMKIN II (Kee *et al.*) [2]. Ce logiciel a été développé par les Laboratoires Sandia de Livermore dans les années 1980. Il permet d'interpréter le mécanisme élaboré qui se présente sous la forme de deux fichiers (Figure IV.1). Dans le premier fichier (chem.inp) sont introduites toutes les réactions chimiques et leurs constantes de vitesse, ainsi que la liste des espèces mises en jeu, constituant le mécanisme cinétique. Le deuxième fichier (therm.dat) contient les données thermodynamiques de toutes les espèces déclarées dans le mécanisme réactionnel. En se basant sur le contenu de ces deux fichiers, le logiciel CHEMKIN II lit les données thermodynamiques de chaque espèce, les réactions chimiques et leurs paramètres cinétiques. Il vérifie ensuite la balance atomique de chacune des réactions chimiques, calcule les constantes de vitesse inverses à partir de la constante d'équilibre et génère finalement un fichier de liaison binaire (chem.bin).

Ce dernier fichier va ensuite être utilisé par différents codes de calcul (PSR, SENKIN, PREMIX,…). Ces codes de calcul permettent de résoudre les équations de conservation de matière et d'énergie propres aux différents dispositifs expérimentaux. Les résultats de la modélisation générés par ces codes sont répertoriés dans des fichiers de sortie (binaire et texte). Ces fichiers contiennent toutes les informations relatives aux espèces mises en jeu et demandées par l'utilisateur (fractions molaires, vitesse de consommation et de formation, analyse de sensibilité).

Dans nos travaux, le code de calcul utilisé est donc PSR pour le réacteur auto-agité, mais d'autres codes de calculs ont aussi pu être utilisés pour la validation du model. Il s'agit ensuite de traiter les fichiers de sortie de façon à obtenir les profils de concentration des espèces consommées et produites au cours de la combustion.

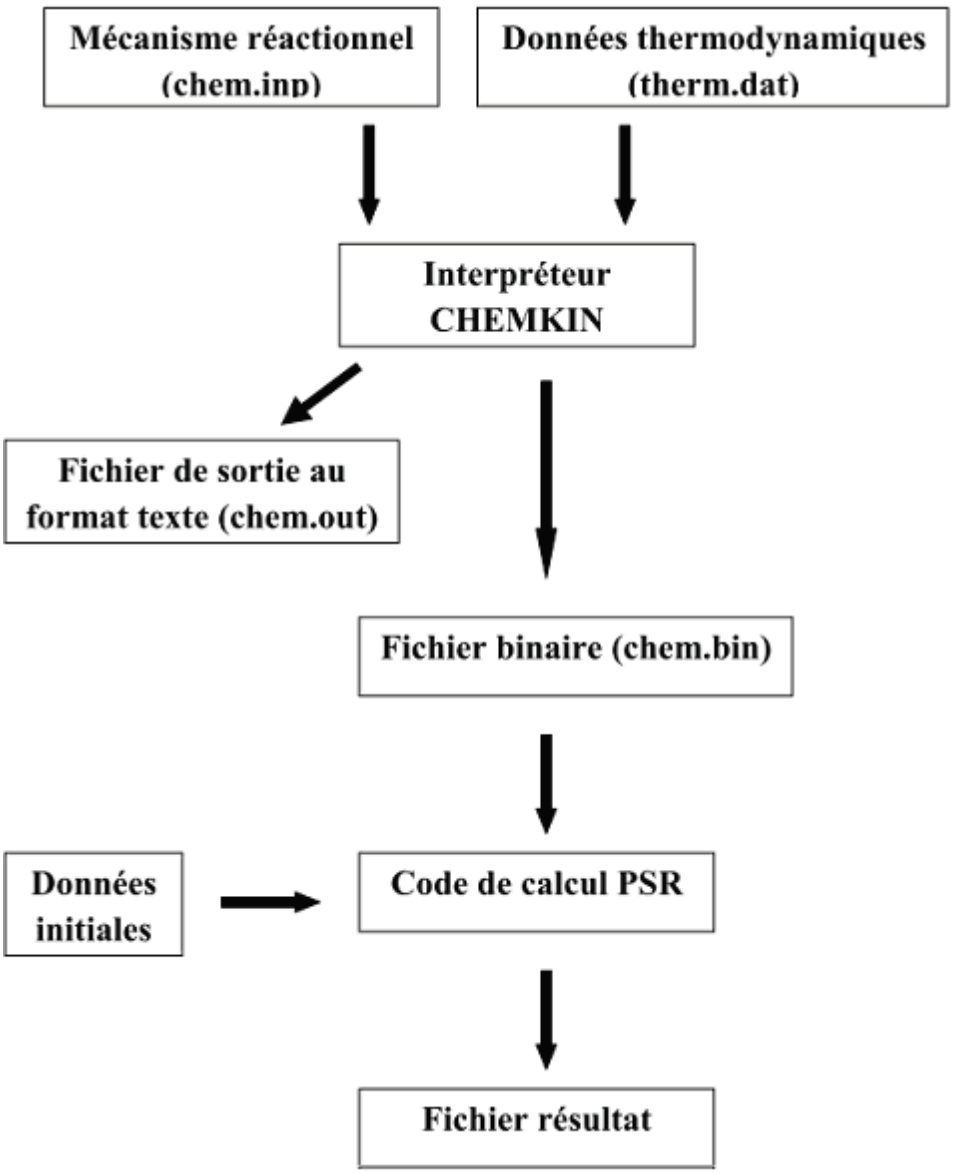


Figure IV.1: Structure du mode de fonctionnement du logiciel CHEMKIN avec le code PSR

4.1.1 Le mécanisme réactionnel

Ce premier fichier est divisé en trois parties distinctes. Il contient toutes les informations essentielles à la lecture et à l'interprétation du mécanisme par CHEMKIN. On trouve dans la première partie tous les éléments chimiques (atomes) intervenant dans le mécanisme. Dans la deuxième partie sont déclarées les différentes espèces mises en jeu dans le mécanisme réactionnel. Enfin, la dernière partie regroupe l'intégralité des réactions chimiques du mécanisme.

Les réactions dans le mécanisme peuvent être prises en compte de manière réversible (symbole = ou <=> entre les réactifs et produits) ou de manière irréversible (symbole =>). Les paramètres cinétiques sont indiqués à la suite de chaque réaction et se présentent sous la forme de trois coefficients : A (cm^3, mole, s^{-1}), n et E ($cal.mol^{-1}$). Ils représentent respectivement le facteur préexponentiel, le coefficient correctif de variation du facteur préexponentiel avec la température et l'énergie d'activation. Chacun de ces coefficients correspond à un paramètre de l'équation d'Arrhénius modifiée:

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

Avec :

T : température [K]

R : constante des gaz parfaits [$cal.K^{-1}.mol^{-1}$]

4.1.2 Les données thermodynamiques

Les données thermodynamiques des différentes espèces mises en jeu dans le mécanisme sont écrites sous forme de polynômes élaborés par la NASA « Chemical Equilibrium Program » [3]. Le format NASA introduit 2 séries de 7 coefficients ($a_{1,k}...a_{7,k}$) permettant de calculer les propriétés thermodynamiques dans deux domaines de températures distincts. Le premier domaine va généralement de 1000 à 5000 K et le deuxième de 300 à 1000 K. Les propriétés thermodynamiques, que sont la capacité calorifique (Cp), l'enthalpie (H) et entropie (S), sont calculées à partir des équations ci-dessous :

$$\frac{C_{p,k}}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4$$

$$\frac{H_k^{\,0}}{RT} = a_{1,k} + a_{2,k}\frac{T}{2} + a_{3,k}\frac{T^2}{3} + a_{4,k}\frac{T^3}{4} + a_{5,k}\frac{T^4}{5} + a_{6,k}\frac{1}{T}$$

$$\frac{S_k^{\,0}}{R} = a_{1,k}\ln T + a_{2,k}T + a_{3,k}\frac{T^2}{2} + a_{4,k}\frac{T^3}{3} + a_{5,k}\frac{T^4}{4} + a_{7,k}$$

L'enthalpie libre G^0 peut être calculé à partir de l'équation $G^0 = H^0 - TS^0$, en connaissant l'enthalpie et l'entropie de l'espèce *k*. Il est alors possible de déterminer la

constante d'équilibre des différentes réactions, ainsi que les constantes de vitesse des réactions inverses.

$$\Delta G^0 = G^0{}_{produits} - G^0{}_{réactifs} = -RT\ln(K_p)$$

$$K_c = \frac{k_{dir}}{k_{rev}} = K_p\left(\frac{P}{RT}\right)^{\Sigma\nu_{produits}-\Sigma\nu_{réactifs}}$$

Avec C_p : capacité calorifique à pression constante

H : enthalpie

S : entropie

ν : coefficients stoechiométriques

k_{dir}, k_{rev} : constantes de vitesse dans le sens direct et inverse

Plusieurs programmes informatiques existent pour calculer les coefficients NASA. Nous avons choisi d'utiliser THERGAS [4] qui utilise la théorie d'additivité des groupes ou de liaison proposée par Benson [5]. Il nous a donc permis de calculer certaines données thermodynamiques pour les molécules et les radicaux libres présents en phase gazeuse dans le mécanisme réactionnel. Ces données ont été par la suite rajoutées dans le fichier thermodynamique « therm.dat ».

4.1.3 Le code de calcul Perfectly Stirred Reactor (PSR)

Le code de calcul PSR, développé par Glarborg *et al.* [1] permet de modéliser les résultats obtenus en réacteur parfaitement agité. Ce réacteur est un volume thermiquement isolé dans lequel un flux stationnaire prémélangé de réactifs est introduit. Le milieu réactionnel est fortement turbulent afin d'assurer l'homogénéité en température et en composition de l'ensemble du réacteur. Dans ces conditions le réacteur est en régime stationnaire, donc la vitesse de conversion des réactifs est uniquement contrôlée par la cinétique chimique.

- ✓ Equations du réacteur auto-agité par jets gazeux

Le système est caractérisé par le volume V du réacteur, le temps de passage τ, le flux massique $\dot{m}$ et la fraction massique des espèces Y_k. Le débit massique est considéré constant au travers du réacteur. Dans la relation ci-dessous on exprime le temps de passage τ en fonction du flux massique, du volume et de la masse volumique ρ.

$$\tau = \rho\left(\frac{V}{\dot{m}}\right) \qquad \rho = \frac{P\bar{M}}{RT}$$

Le régime étant stationnaire, les principes qui régissent le fonctionnement des réacteurs auto-agité sont la conservation de la masse et de l'énergie.

La conservation de la masse s'exprime par :

$$\dot{m}\left(Y_{k,S} - Y_{k,E}\right) - \dot{\omega} M_k V = 0$$

La conservation de l'énergie s'exprime par :

$$\dot{m} \sum_{k=1}^{K}\left(Y_{k,S}h_{k,S} - Y_{k,E}h_{k,E}\right) + Q = 0$$

Avec $Y_{k,E}$: fraction massique de l'espèce k à l'entrée du réacteur

$Y_{k,S}$: fraction massique de l'espèce k à la sortie du réacteur

$\dot{\omega}_k$: vitesse nette de production de l'espèce k

M_k : masse molaire de l'espèce k

Q : perte thermique du réacteur

$h_{k,E}$: enthalpie massique de l'espèce k à l'entrée du réacteur

$h_{k,S}$: enthalpie massique de l'espèce k à la sortie du réacteur

Les équations de conservation de la masse et de l'énergie décrivent un système de K+1 équations algébriques non linéaires, dont les solutions sont les fractions massiques des espèces présentes dans le mécanisme et la température. La résolution de ce système nécessite la connaissance des concentrations initiales des réactifs, du temps de passage et de la pression dans le réacteur.

✓ Résolution du système d'équation

Le système de K+1 équations est résolu par la méthode de Newton-Raphson. Cette technique de résolution nécessite une estimation initiale de la solution (température et concentration) afin de démarrer le processus itératif. La première estimation de la solution est calculée par le programme STANJAN de Reynolds [6], qui permet de déterminer la composition à l'équilibre thermodynamique (pression et température constantes). Cette première solution est obtenue en minimisant l'enthalpie libre de Gibbs.

Dans certains cas, cette estimation ne permet pas la convergence du système d'où une non résolution des équations. Dans ces conditions le système bascule sur l'intégration numérique des équations en régime transitoire. Une nouvelle estimation de la solution est alors obtenue et est utilisée pour résoudre une nouvelle fois le système avec de la méthode de Newton-Raphson.

✓ Analyse de voies réactionnelles

L'analyse des voies réactionnelles permet de déterminer les principales voies de consommation et de formation d'une espèce k présente dans le mécanisme réactionnel. Les vitesses globales de formation $V_{f,k}$ et de consommation $V_{c,k}$ de l'espèce k sont calculées par le code de calcul PSR et sont exprimées par :

$$V_{f,k} = \sum_{i=1}^{I} v_{f,k,i} \qquad V_{c,k} = \sum_{i=1}^{I} v_{c,k,i}$$

Les principales réactions qui forment et qui consomment chaque espèce chimique sont identifiables. En effet, la vitesse nette de chaque processus est calculée, ainsi que sa contribution relative parmi l'ensemble des réactions de production ou de consommation de l'espèce considérée.

✓ Analyse de sensibilité

Des analyses de sensibilité peuvent également être effectuées sur une espèce k du mécanisme à une richesse et une température fixe. Ces analyses permettent d'étudier l'influence de chaque réaction présente dans le mécanisme sur la formation et la consommation de l'espèce k à analyser. Le coefficient de sensibilité $S_{k,i}$ d'une espèce k pour une réaction i est donné par la relation suivante:

$$S_{k,i} = \frac{\partial \ln Y_k}{\partial \ln k_i} = \frac{k_i}{Y_k}\left(\frac{\partial Y_k}{\partial k_i}\right)$$

Ainsi, un coefficient de sensibilité positif signifie que la concentration de l'espèce k augmente avec la constante de vitesse k_i. A l'inverse, pour un coefficient de sensibilité négatif la concentration de l'espèce k diminue lorsque la vitesse augmente.

4.2 Développement d'un modèle cinétique

Le développement d'un mécanisme cinétique chimique détaillé d'un hydrocarbure lourd ou d'un mélange d'hydrocarbures, tel que le kérosène conventionnel ou alternatif, se fait de façon très méthodique. En effet, l'oxydation d'une espèce hydrocarbonée de type C_xH_y dans l'air ou dans l'oxygène n'est pas une simple réaction se faisant en une seule étape. Réduire celle-ci pour un composé organique à la réaction « globale » ci-dessous ne permet pas la description et la compréhension des phénomènes complexes se déroulant lors de la combustion :

$$C_xH_y + (x + \frac{1}{4}\, y)\, O_2 \longrightarrow xCO_2 + \frac{1}{2}\, yH_2O$$

Ainsi le développement d'un mécanisme se fait en ajoutant successivement les réactions des espèces contenant un nombre d'atomes de carbone supérieur. De cette façon, les modèles cinétiques d'oxydation des hydrocarbures sont constitués de sous-mécanismes ou couches (Figure IV.2).

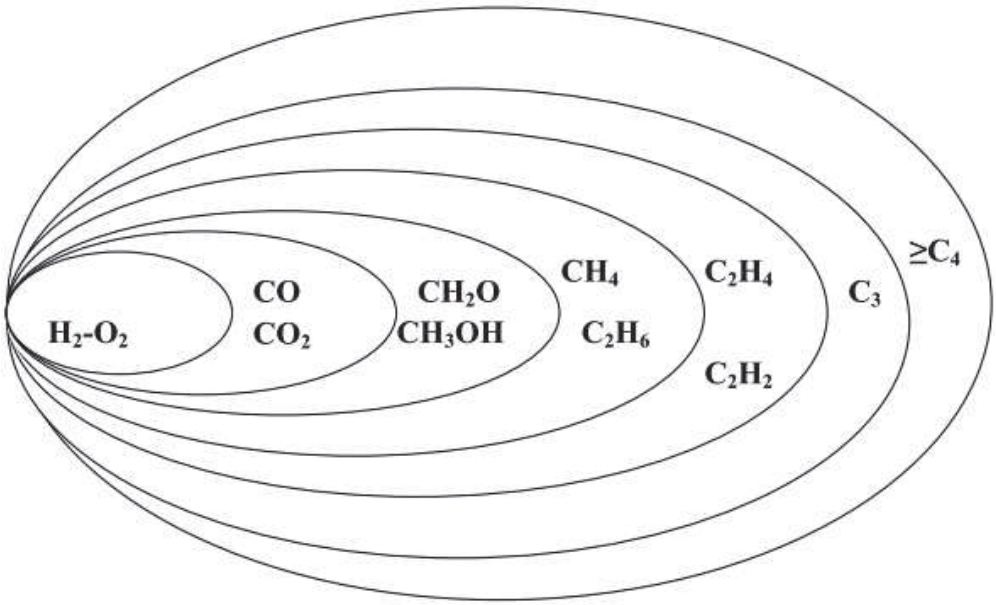


Figure IV.2: Structure schématique du sous-mécanisme C_0-C_4

Sur la figure IV.2, on peut voir que le mécanisme cinétique d'oxydation d'un hydrocarbure se compose d'un noyau commun à toutes les espèces fortement hiérarchisé auquel se greffe une partie spécifique à la molécule étudiée. Ce noyau commun constitue la base C_0-C_4 du mécanisme et a donc une forte influence sur l'oxydation des composés de taille plus importante. Il doit ainsi être validé sur de nombreux résultats couvrant un large domaine de pression et de température.

4.2.1 Sous-mécanismes C_0-C_4

Ce sous-mécanisme regroupe les réactions unimoléculaires et bimoléculaires des espèces de petites tailles (au plus 4 atomes de carbone). Les paramètres cinétiques utilisés sont issus en majorité de la littérature. Cette base repose sur différentes études menées au sein du laboratoire. Certaines réactions se trouvant dans cette base présentent une dépendance en pression. Cette influence de la pression a été décrite en utilisant le formalisme de Lindemann ou de Troe [7].

4.2.2 Structure et développement du sous-mécanisme d'un hydrocarbure lourd

Comme vu précédemment, l'oxydation d'une espèce hydrocarbonée de type C_xH_y ne se fait pas en une seule étape mais en une multitude de réactions chimiques. Les réactions typiques intervenant dans un mécanisme complexe sont en général divisées en quatre types : les processus d'amorçage, les processus de propagation, les processus de ramification et les processus de terminaison. La figure IV.3 décrit le mécanisme d'oxydation d'un hydrocarbure quelconque, en détaillant les différents types de réactions qui sont mis en jeux. De plus, on distingue deux domaines de réactivité en température dans le schéma général d'oxydation d'un hydrocarbure. Le premier domaine décrit les réactions se déroulant à une température inférieure à ≈750 K et est appelé domaine de basse température. La faible exothermicité de ce domaine lui a valu la dénomination de flamme froide. Le deuxième domaine dit de haute température correspond aux réactions intervenant à une température supérieure à ≈750 K. Entre environ 650 et 750 K on observe une diminution de la conversion du carburant alors que la température augmente, c'est la zone de coefficient négatif de température (NTC).

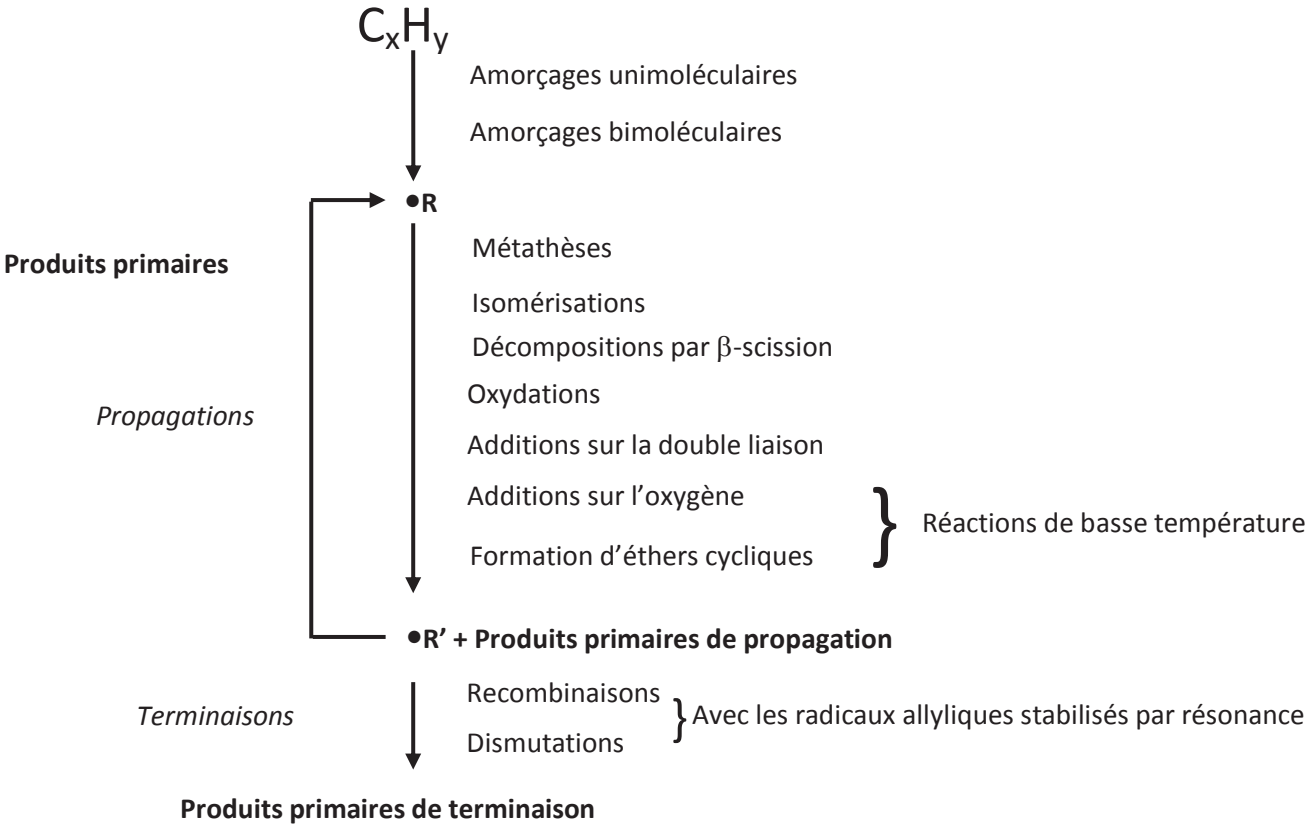


Figure IV.3: Mécanisme primaire

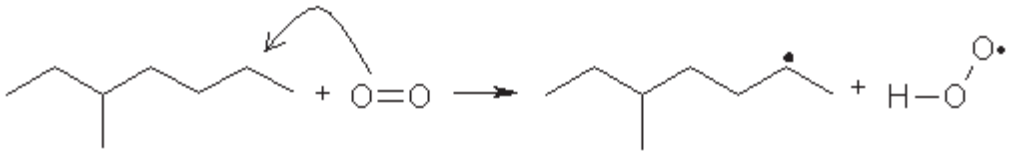
De manière générale, l'oxydation commence par les amorçages unimoléculaires et bimoléculaires avec l'oxygène, de façon à produire quelques radicaux qui pourront initier la conversion. Les réactions de métathèses correspondent à l'arrachage d'un atome d'hydrogène à l'hydrocarbure de départ par de petits radicaux (O, H, OH, HO_2, HCO, CH_3, etc.), produisant les radicaux primaires. Ensuite, les isomérisations répartissent la quantité des différents radicaux en fonction de leur stabilité et de leur quantité produite par les réactions d'amorçages et les métathèses. Le type de réaction qui décompose ensuite les radicaux dépend du régime de température dans lequel on se trouve.

Le développement d'un sous-mécanisme pour un hydrocarbure doit prendre en compte ces trois régimes d'oxydation et se fait donc de façon méthodique, dans le but de n'oublier aucune réaction. Tous ces différents types de réactions citées précédemment se présentent de la manière suivante (exemple du 3-méthylheptane) :

- ✓ Les amorçages unimoléculaires



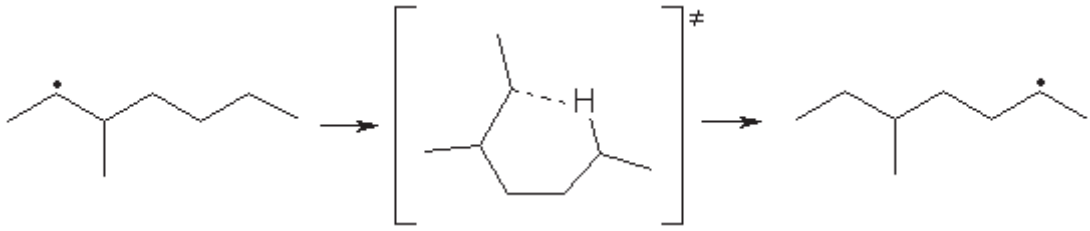
- ✓ Les amorçages bimoléculaires



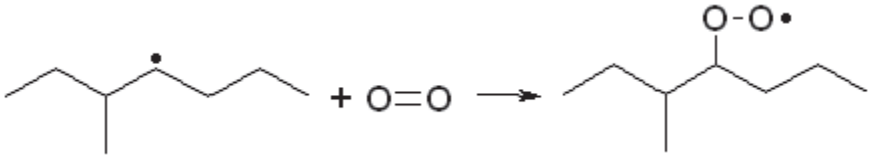
- ✓ Les réactions de métathèses



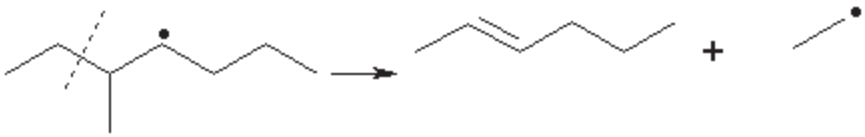
- ✓ Les réactions d'isomérisation des radicaux



✓ Les réactions d'addition sur l'oxygène



✓ Les réactions de décomposition de radicaux par β-scission



✓ Les réactions d'oxydation



4.2.3 Mécanisme d'oxydation du kérosène

Le kérosène ou le kérosène reformulé contient un nombre important d'espèces appartenant à différentes familles de composés (n-alcanes, iso-alcanes, aromatiques, naphtènes) [8, 9, 10]. Cela rend l'étude de ces carburants très complexe par modélisation. Cependant, le mélange de certains hydrocarbures modèles représentant chaque famille d'espèces présentes dans un kérosène peut permettre de représenter l'oxydation de ces carburants complexes. Cela donne ainsi la possibilité d'avoir une meilleure représentation de la chimie de combustion des carburéacteurs.

Dans la littérature le kérosène conventionnel a souvent été modélisé en utilisant des mélanges simples dont le mélange n-décane, n-propylcyclohexane et n-propylbenzène [8, 11-14]. De plus, d'autres mélanges de même composition dans lesquels l'iso-octane a été rajouté ont permis de modéliser des kérosènes reformulés [13-16]. Ces hydrocarbures représentent respectivement les familles des paraffines linéaires, des naphtènes, des aromatiques et des iso-paraffines.

Le sous-mécanisme cinétique du n-décane a été initialement développé par Diévart dans ses travaux de thèse [17]. Quelques modifications supplémentaires ont été apportées par Mzé-Ahmed lors de sa thèse [14], notamment sur les constantes des réactions d'initiation bimoléculaire, les réactions de métathèse entre le n-décane et le radical HO_2 et les réactions de β-scission. Le sous-mécanisme du n-propylcyclohexane a été développé lui aussi par Diévart au cours de sa thèse. Le sous-mécanisme de l'iso-octane est quand à lui issu des travaux effectués à Orléans par Dagaut et Togbé [18, 19] dans le but de représenter l'oxydation du kérosène synthétique SPK, contenant une fraction importante d'iso-paraffines [20]. Enfin, le sous-mécanisme du n-propylbenzène résulte des travaux de Mati [21] et a été intégré au mécanisme par Diévart.

4.2.4 Mécanisme d'oxydation de kérosènes de synthèse

Pour modéliser nos expériences, un mécanisme cinétique détaillé a été développé pour l'oxydation de plusieurs kérosènes synthétiques. Pour cela nous avons repris la base du mécanisme existant, comportant donc les sous-mécanismes du n-décane, du n-propylcyclohexane, du n-propylbenzène et de l'iso-octane, dans lequel nous avons fait un certain nombre de modifications. Cependant, les études précédentes [13, 15, 16] effectuées sur ces kérosènes synthétiques ont montrées qu'un modèle plus complexe représentant mieux la composition chimique du carburant pourrait permettre d'optimiser la modélisation de leur oxydation.

Le noyau C_0-C_4 a été tout d'abord été remplacé entièrement (mécanisme réactionnel + données thermodynamiques) par une base plus récente car de nombreuses améliorations y ont été apportées. Cette nouvelle base est issue des travaux de recherche sur différents hydrocarbures menés dans l'équipe [22, 23]. De plus, des modifications ont été apportées aux paramètres cinétiques des sous-mécanismes du n-décane, de l'iso-octane et du n-propylcyclohexane.

- Toutes les constantes de vitesse des réactions d'arrachage d'un hydrogène par métathèses des alcènes 1-pentène, 1-hexène, 1-heptène et 1-octène ont été modifiées par les constantes issues des travaux de recherche de Sylvain Touchard [24]. Les constantes de vitesse des réactions de métathèse des dienes 1,3-pentadiène et 1,4-pentadiène ont aussi été modifiées en utilisant les mêmes constantes.

- Les constantes de vitesse et plus précisément le facteur préexponentiel des réactions d'oxydation des radicaux primaires du n-décane on été modifiées et sont détaillées dans le tableau IV.1.

Tableau IV.1 : Modifications apportées aux constantes cinétiques des réactions de d'oxydation des radicaux décyles

Réaction	A(s^{-1})	n	E (cal.mol^{-1})	Référence
Ac10h21+O_2⇌c10h20-1+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	Touchard [24]
Bc10h21+O_2⇌c10h20-1+ho2	$6{,}900.10^{11}$	0,00	5000,0	
Bc10h21+O_2⇌c10h20-2+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	
Cc10h21+O_2⇌c10h20-2+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	
Cc10h21+O_2⇌c10h20-3+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	
Dc10h21+O_2⇌c10h20-3+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	
Dc10h21+O_2⇌c10h20-4+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	
Ec10h21+O_2⇌c10h20-4+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	
Ec10h21+O_2⇌c10h20-5+ho2	$1{,}580.10^{12}$	0,00	5000,0	

- Les constantes de vitesse des réactions de décomposition par β-scission des radicaux primaires de l'iso-octane ont été vérifiées. Celle du 2,4,4-triméthylpent-2-yl (bddtmpe2) a été modifiée : bddtmpe2⇌tc4h9+ic4h9. La constantes de vitesse de cette réaction était : $5{,}0.10^{13}\exp(-34500/RT)$, elle a été remplacée par : $2{,}0.10^{13}\exp(-26700/RT)$ provenant des travaux de thèse de Touchard [24] et des travaux de Glaude *et al.* (1999).

- Les constantes de vitesse des réactions de décomposition par β-scission des radicaux primaires du n-propylcyclohexane ont été vérifiées et modifiées (Tableau IV.2). Les constantes initiales ont été remplacées par celles référencées dans les travaux de recherche de Touchard.

Tableau IV.2 : Modifications apportées aux constantes cinétiques des réactions β-scissions des radicaux primaires du n-propylcyclohexane

Réaction	A(s^{-1})	n	E (cal.mol^{-1})	Référence
 ⇌mchA+c2h4	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ cyc6h11+c3h6	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ eche1+ch3	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ c2h4+c2h4+Cc5h9-	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ c2h5+mche1	$1{,}580.10^{12}$	0,00	28700,0	
 ⇌ c2h4+p2c4h614	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ cyc6h10+nc3h7	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	Touchard
 ⇌ c2h4+Ac7h13-3	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	[24]
 ⇌ c2h4+c4h6+nc3h7	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ c5h10+Dc4h7-1	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ c2h5+c7h12-16	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ c2h4+Dc7h13-1	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ c5h10+Dc4h7-1	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	
 ⇌ nc3h7+c6h10-15	$2{,}000.10^{13}$	0,00	28700,0	

- De la même façon que pour les radicaux décyles, les constantes de vitesse des réactions d'oxydation des radicaux primaires du n-propylcyclohexane on été remplacées par les constantes répertoriées dans la thèse de Touchard [24].

Enfin, plusieurs sous-mécanismes ont été rajoutés à ceux déjà présents, comme celui de la décaline (décahydronaphthalène) et de la tétraline (1,2,3,4-tétrahydronaphtaline) développés en collaboration avec Politecnico di Milano [25, 26] pour représenter respectivement les di-naphtènes et les naphténo-aromatiques. En effet, jusqu'ici les di-

naphtènes présents dans certains kérosènes reformulés étaient représentés par du n-propylcyclohexane alors que la fraction des naphténo-aromatiques n'était pas représentée du tout. Pour cela, environ 400 réactions et 20 nouvelles espèces ont été rajoutées au mécanisme pour l'oxydation de ces deux hydrocarbures, ainsi que les données thermodynamiques pour les nouvelles espèces impliquées.

Les mécanismes du 2-méthylheptane et du 3-méthylheptane développés en collaboration avec le Lawrence Livermore National Laboratory [27, 28, 29] ont eux aussi été rajoutés au mécanisme de base pour représenter la part des iso-paraffines, non pas avec une seule molécule mais avec un mélange de plusieurs iso-paraffines. Pour cela, environ 1812 réactions et 436 nouvelles espèces ont été rajoutées au mécanisme. Les données thermodynamiques des nouvelles espèces ont de même été ajoutées aux données thermodynamiques initiales. Quelques modifications ont dues être apportées aux différents sous-mécanismes pour améliorer les simulations.

- Toutes les constantes de vitesse des réactions de décomposition par β-scissions des radicaux primaires du 2-méthylheptane et du 3-méthylheptane ont été remplacées par celles répertoriées dans les travaux de thèses de Touchard [24].
- Des isomérisations manquantes des radicaux primaires du 2-méthylheptane et du 3-méthylheptane ont été rajoutées au mécanisme.

Nous avons ainsi utilisé différents mélanges pouvant contenir jusqu'à 8 hydrocarbures modèles pour représenter l'oxydation de kérosènes de synthèse. Le mécanisme utilisé pour modéliser l'oxydation d'un kérosène de synthèse comprend, après tri et rajout des différents sous-mécanismes, 2430 espèces intervenant dans 10962 réactions.

La méthodologie de construction des différents carburants modèles pour représenter l'oxydation des kérosènes synthétiques repose sur trois étapes principales :

- La première étape consiste en une analyse détaillée du carburant commercial (SPK, GtL, CtL) afin de déterminer précisément sa composition chimique (n-alcane, iso-alcane, aromatiques, naphtènes, etc.) et ses propriétés physicochimiques (indice de cétane, rapport H/C, densité, masse molaire, etc.)

- On choisit, lors de la deuxième étape, les hydrocarbures modèles qui pourront représenter idéalement chacune des familles chimiques présentes dans le carburant initial.
- Enfin, la troisième étape consiste à choisir les fractions molaires de chacun des hydrocarbures précédents afin de composer le mélange idéal représentant au mieux les caractéristiques physico-chimiques du carburant initial.

Lorsque cela est possible, on représentera une famille chimique par un seul hydrocarbure pour ne pas alourdir le modèle. Cependant, comme indiqué précédemment, des modèles trop simplifiés ne permettent pas de modéliser au mieux l'oxydation de carburant complexes [13, 15, 16]. Le problème s'est posé notamment avec les iso-paraffines, représentées jusqu'à maintenant par l'iso-octane qui s'est montré être un mauvais représentant de cette famille [13]. Les candidats choisis ont donc été des isomères de cette molécule, à savoir le 2-méthylheptane et le 3-méthylheptane. Cependant, ces iso-paraffines se sont avérées présenter chacune des avantages et des inconvénients en ce qui concerne les fractions molaires des produits formés lors de l'oxydation des carburants. En effet, l'isobutène par exemple sera formé essentiellement par le 2-méthylheptane qui formera en revanche trop de 1-pentène. Le 3-méthylheptane à l'inverse ne formera lui pas assez d'isobutène. L'iso-octane quand a lui formera beaucoup trop d'isobutène mais aura l'avantage d'avoir un indice de cétane très bas. Autant d'avantages et d'inconvénients qui font que la famille chimique des iso-paraffines n'a pas pu être représentée par une seule espèce.

Le choix de ces hydrocarbures s'appuie aussi sur les caractéristiques physico-chimiques du carburant initial. Parmi celles-ci nous nous sommes intéressés à l'indice de cétane, de manière à ce que le mélange modèle ait une réactivité proche de celle du carburant initial. Nous nous sommes aussi attachés à respecter le rapport H/C et la masse molaire, ainsi que la densité de ces carburants modèles, pour rester le plus possible en cohérence avec le carburant de départ.

Nous sommes partis du précédent mélange modèle étudié pour ces mêmes carburants. Nous avons ensuite fait pas à pas des modifications afin d'essayer d'obtenir le mélange le plus représentatif de la composition initiale du carburéacteur, ainsi que de ses caractéristiques physico-chimiques. Enfin, le mélange final a été testé dans différentes conditions de façon à

vérifier la validité de celui-ci en comparant la fraction molaire des produits et intermédiaires stables formés lors de la combustion de ce mélange.

4.2.4.1 *Mélange modèle d'oxydation du CtL Sasol*

Le premier kérosène de synthèse étudié dans cette étude est un kérosène synthétique formé à partir de la synthèse Fischer-Tropsch (FT). Ce kérosène de synthèse, appelé CtL (Coal to Liquid), est formé à partir du charbon et a été fourni par le groupe pétrochimique Sasol. Sa composition chimique est décrite dans le tableau IV.3. Les caractéristiques physico-chimiques de ce kérosène sont les suivantes : $C_{11,06}H_{21,6}$; masse molaire M = 154,32 g.mol^{-1} ; densité ρ = 0 ,815 g.cm^{-3} ; rapport H/C = 1,95 ; indice de cétane DCN = 32,7 (ASTM D7668).

Tableau IV.3 : Composition chimique du CtL (Sasol)

Famille chimique	Fraction massique (%)	Espèces principales
iso-paraffines	36,3	$C_{10} - C_{12}$
n-paraffines	5,7	$C_9 - C_{11}$
mononaphtènes	16,1	$C_9 - C_{13}$
di-naphtènes	28,3	$C_{10} - C_{15}$
monoaromatiques	4	$C_{10} - C_{13}$
naphténo-aromatiques	9,6	/

L'oxydation de ce même carburant synthétique a déjà été étudié et modélisé auparavant par un mélange composé de n-décane, d'iso-octane, de n-propylcyclohexane et de n-propylbenzène pour représenter la majeure partie des familles chimiques présentes [15]. La fraction massique de chacun de ces constituants étaient : 43,1% n-décane ; 11,4% iso-octane ; 36,1% n-propylcyclohexane ; 9,4% n-propylbenzène. Ce premier mélange avait pour formule chimique $C_{9,27}H_{18,97}$, or pour 1000 ppm de CtL injecté, 11060 ppm de carbone ont été introduit dans le réacteur. Il a donc fallu injecter 1194 ppm de mélange modèle pour obtenir la même quantité de carbone.

Dans un premier temps, nous avons choisi de remplacer une partie du n-propylcyclohexane par de la décaline pour mieux satisfaire la composition du CTL en

représentant la fraction des di-naphtènes. La composition en fraction massique de ce nouveau mélange était donc : 43,1% n-décane ; 11,4% iso-octane ; 12,1% n-propylcyclohexane ; 24% décaline ; 9,4% n-propylbenzène, avec pour formule chimique $C_{9,5}H_{18,99}$. La fraction molaire de ce mélange nécessaire pour représenter les 11060 ppm de CtL était ainsi de 1164 ppm.

Ces mélanges présentaient une réactivité trop élevée par rapport au kérosène synthétique initial. Ceci s'explique par l'indice de cétane de ces deux mélanges beaucoup trop élevé, dû à une quantité de n-décane trop importante dans le mélange. Cependant, on a pu voir que l'ajout de décaline diminuait légèrement cette réactivité. De plus, certains produits comme l'éthylène et l'isobutène étaient également formés en trop grande quantité à basse température par rapport au kérosène. La modification des proportions de n-décane et d'iso-octane, en diminuant la quantité de n-décane, pourrait permettre de baisser la réactivité du mélange et ainsi améliorer la représentation de l'oxydation du CtL.

Dans le deuxième mélange nous avons donc décidé d'essayer de faire correspondre au mieux les indices de cétane, en augmentant la proportion d'iso-octane et en diminuant considérablement celle de n-décane. En faisant cela, l'indice de cétane est passé de 52 pour les deux premiers mélanges à 36 pour celui-ci (Indices de cétane calculés [30]). De plus, les proportions des autres hydrocarbures ont été légèrement modifiées de façon à se rapprocher de la composition donnée par Sasol, à l'exception des naphténo-aromatiques qui ont été intégrés au n-propylbenzène. La composition massique de ce mélange est : 15% n-décane ; 27% iso-octane ; 16,1% n-propylcyclohexane ; 28,3% décaline ; 13,6% n-propylbenzène, avec pour formule chimique $C_{9,09}H_{17,67}$. Pour obtenir la même quantité de carbone que le CtL, 1217 ppm de mélange ont été injectés. La modification de ces proportions a considérablement fait chuter l'indice de cétane de ce mélange, faisant ainsi baisser visiblement la réactivité globale. Cependant, l'augmentation généreuse de la fraction d'iso-octane a eu comme conséquence une hausse importante de la quantité d'isobutène produite. En effet, les 155 ppm d'iso-octane injecté dans les mélanges précédents étaient utilisés pour représenter correctement le profil d'isobutène.

Nous avons ensuite, dans un premier temps, voulu intégrer le sous-mécanisme de la tétraline au model actuel pour représenter la part des naphténo-aromatiques. Pour déterminer l'impact de cette modification, aucun autre changement n'a été effectué. La composition massique de ce mélange est donc : 15% n-décane ; 27% iso-octane ; 16,1% n-

propylcyclohexane ; 28,3% décaline ; 4% n-propylbenzène, 9,6% tétraline, avec pour formule chimique $C_{9,19}H_{17,68}$. Il a donc fallu injecter 1204 ppm de ce mélange modèle pour obtenir la même quantité de carbone que le CtL. Hormis une très légère baisse de réactivité à basse température, aucune autre évolution n'a pu être observé.

Le mélange modèle suivant a été élaboré pour rétablir la quantité d'isobutène produite en remettant la fraction d'iso-octane initiale, soit une fraction massique de 11,5%. Le reste a été complété par du n-décane et les fractions des autres composés sont restées identiques au précédent mélange. Les concentrations massiques de ce mélange sont maintenant : 30,5% n-décane ; 11,5% iso-octane ; 16,1% n-propylcyclohexane ; 28,3% décaline ; 4% n-propylbenzène, 9,6% tétraline, avec pour formule chimique $C_{9,52}H_{18,29}$ et donc 1162 ppm ont été injectés. Le résultat obtenu avec ce mélange est une forte augmentation de la réactivité globale (CN = 47), avec cependant un profil d'isobutène à nouveau bien représenté par le modèle.

Nous avons cherché à satisfaire au mieux toutes ces contraintes, c'est à dire en reproduisant la quantité d'isobutène produite et en diminuant la réactivité du mélange, donc en diminuant la quantité initiale de n-décane. Nous avons ajouté le sous-mécanisme du 3-méthylheptane au mécanisme initial et introduit la bonne quantité de n-décane, la quantité nécessaire d'iso-octane et complété le reste avec du 3-méthylheptane. Les concentrations massiques de ce mélange sont ainsi : 5,7% n-décane ; 11,5% iso-octane ; 24,8% 3-méthylheptane ; 16,1% n-propylcyclohexane ; 28,3% décaline ; 4% n-propylbenzène, 9,6% tétraline, avec pour formule chimique $C_{9,00}H_{17,40}$. La quantité nécessaire de ce mélange pour obtenir la même quantité de carbone que le CtL est de 1229 ppm. Ce mélange reproduit bien la réactivité globale du CtL et la majorité des espèces. Certaines espèces comme le 1-butène et la 2-butanone restent légèrement surestimées car cela est directement lié à la décomposition du 3-méthylheptane.

Pour aller plus loin, nous avons décidé d'inclure dans le mécanisme actuel le sous-mécanisme du 2-méthylheptane de façon à supprimer l'iso-octane du mélange et diminuer la fraction de 3-méthylheptane. Cependant, ce CtL produit une très grande quantité d'isobutène et possède un indice de cétane très bas. Il a donc été impossible de remplacer entièrement l'iso-octane pour représenter l'oxydation de ce carburant de synthèse. Nous avons tout de même fait le test de remplacer une partie du 3-méthylheptane et de l'iso-octane par du 2-

méthylheptane. Cela donne un mélange à 8 composés avec les concentrations massiques suivantes : 5,7% n-décane ; 9,9% iso-octane ; 13,2% 3-méthylheptane ; 13,2% 3-méthylheptane ; 16,1% n-propylcyclohexane ; 28,3% décaline ; 4% n-propylbenzène, 9,6% tétraline, avec pour formule chimique $C_{9,00}H_{17,40}$. La formule brute reste inchangée étant donné que l'iso-octane, le 2-méthylheptane et le 3-méthylheptane sont des isomères. L'ajout du 2-méthylheptane a eu pour conséquence de diminuer légèrement la quantité de 1-butène et d'isobutène. En revanche, une autre conséquence a été de quasiment doubler la quantité de 1-pentène produite. Ainsi, puisqu'il n'est pas possible de remplacer la totalité de l'iso-octane dans ce mélange, l'ajout de 2-méthylheptane s'avère ne pas être d'une grande utilité.

Le mélange modèle choisi pour représenter le CtL est donc le modèle précédent, dont la composition est détaillée dans le tableau IV.4. Ce mélange a un indice de cétane de 41 [30], un rapport H/C de 1,934, une densité de 0.799 $g.cm^{-3}$ et une masse molaire de (9*12+17,4)*1,229 = 154,12 $g.mol^{-1}$. Les caractéristiques physico-chimiques de ce mélange sont donc très proches de celles du CtL.

Tableau IV.4 : Composition du mélange utilisé pour la simulation de l'oxydation du CTL (Sasol)

	formule chimique	**fraction massique (%)**	**fraction molaire (%)**	**concentration (ppm)**
n-décane	$C_{10}H_{22}$	5.7	5	62
iso-octane	C_8H_{18}	11.5	12.6	155
3-méthylheptane	C_8H_{18}	24.8	27.3	335
n-propylcyclohexane	C_9H_{18}	16,1	16.0	197
décaline	$C_{10}H_{18}$	28,3	25.7	316
n-propylbenzène	C_9H_{12}	4	4.2	52
tétraline	$C_{10}H_{12}$	9,6	9,1	112

4.2.4.2 *Mélange modèle d'oxydation du GtL Shell*

Le kérosène de synthèse suivant est aussi un kérosène synthétique produit à partir de la synthèse F-T, en utilisant du gaz naturel. On appelle ces carburants des GtL (Gas to Liquid). Ce kérosène a été fourni par Shell et sa composition chimique est décrite dans le tableau IV.5.

Les caractéristiques physico-chimiques de ce kérosène sont les suivantes : $C_{10,45}H_{23,06}$; masse molaire M = 148,46 g.mol^{-1} ; densité ρ = 0 ,737 g.cm^{-3} ; rapport H/C = 2,20 ; indice de cétane CN = 57,94 (ASTM D7668).

Tableau IV.5 : Composition chimique du GTL (Shell)

Famille chimique	Fraction massique (%)	Espèces principales
iso-paraffines	62,8	$C_{10} - C_{12}$
n-paraffines	28,1	$C_9 - C_{11}$
di-naphtènes	8,2	C_{10}-C_{11}
mononaphtènes	0.6	$C_9 - C_{11}$
monoaromatiques	0.2	$C_9 - C_{10}$

Ce carburant synthétique a déjà été étudié et modélisé dans une étude précédente par un mélange dont la fraction massique de chacun de ses constituants étaient : 62,4% n-décane ; 28,8% iso-octane ; 8,8% n-propylcyclohexane [16]. Ce premier mélange avait pour formule chimique $C_{9,24}H_{20,31}$. Or, pour 1000 ppm de GtL injectés 10450 ppm de carbone étaient introduits dans le réacteur. Il a donc fallu introduire 1130 ppm de ce mélange modèle pour obtenir la même quantité de carbone qu'avec le GtL.

Dans le premier mélange modèle, nous avons choisi de remplacer la totalité du n-propylcyclohexane par de la décaline, la majorité des naphtènes étant des di-naphtènes dans le CtL. Cette modification a eu pour conséquence une légère baisse de la réactivité globale du mélange. Les concentrations massiques de ce mélange sont : 62,4% n-décane ; 28,8% iso-octane ; 8,8% décaline, avec pour formule chimique $C_{9,33}H_{20,32}$. Pour obtenir la même quantité de carbone que le GtL, 1120 ppm de ce mélange ont été utilisés.

Or, par comparaison avec les données du GtL, on a pu voir que ces mélanges ont été développés essentiellement en s'appuyant sur la réactivité du carburant, donc sur l'indice de cétane. En effet, le ratio n-décane/iso-octane est très loin de la composition réelle du kérosène donnée par Shell. De plus, la fraction molaire d'isobutène formée est très largement surestimée par rapport au GtL initial, ce qui signifie que la forte proportion d'iso-alcanes dans le GtL ne favorise pas la formation d'isobutène. La raison peut être qu'une grande partie des

iso-alcanes présents dans le GtL ne sont pas ramifiés sur le « deuxième carbone », ce qui favoriserait la production d'isobutène.

Nous avons donc choisi de modifier les proportions du mélange de façon à introduire une quantité réaliste de n-décane pour les n-alcanes, une quantité réaliste de décaline pour les di-naphtènes et la quantité suffisante d'iso-octane permettant de former la bonne quantité d'isobutène. La fraction massique restante a été complétée par du 3-méthylheptane. Les concentrations massiques de ce mélange sont ainsi : 28,1% n-décane ; 5,3% iso-octane ; 57,8% 3-méthylheptane ; 8,8% décaline, avec pour formule chimique $C_{8,64}H_{18,97}$. La quantité nécessaire de ce mélange pour obtenir la même quantité de carbone que le GtL est de 1209 ppm. Ce mélange reproduit convenablement la réactivité du kérosène synthétique et un grand nombre de profils d'espèces, y compris l'isobutène, mais il surestime beaucoup trop le 1-butène et la 2-butanone et sous-estime le 1-pentène et le 1-hexene. Ceci est directement lié à la décomposition du 3-méthylheptane.

Pour finir, nous avons décidé de remplacer entièrement l'iso-octane du mélange précédent par du 2-méthylheptane en introduisant la quantité idéale de ce dernier pour représenter la quantité d'isobutène formée. Les concentrations détaillées de ce mélange sont décrites dans le tableau IV.6. Il a pour formule chimique globale $C_{8,64}H_{18,97}$, ce qui nécessite d'introduire 1209 ppm de celui-ci pour obtenir la même quantité de carbone qu'avec le GtL . Ce nouveau mélange possède un indice de cétane calculé de 56 [30], un rapport H/C de 2,195, une densité de 0,724 $g.cm^{-3}$ et une masse molaire de (8,64*12+18,97)*1,209 = 148,28 $g.mol^{-1}$. Les caractéristiques physico-chimiques de ce mélange sont donc très proches de celles du GtL. De plus, l'ajout de 2-méthylheptane permet de diminuer la proportion de 3-méthylheptane et ainsi de diminuer la formation de 1-butène et de 2-butanone et d'augmenter celle de 1-pentène.

Tableau IV.6 Composition du mélange utilisé pour la simulation de l'oxydation du GTL (Shell)

	formule chimique	**fraction massique (%)**	**fraction molaire (%)**	**concentration (ppm)**
n-décane	$C_{10}H_{22}$	28,1	24,3	294
2-méthylheptane	C_8H_{18}	30	32,3	390
3-méthylheptane	C_8H_{18}	33,1	35,6	431
décaline	$C_{10}H_{18}$	8,8	7,8	94

4.2.4.3 *Mélange modèle d'oxydation du SPK (IFP)*

Le dernier kérosène de synthèse est un kérosène synthétique paraffinique (Synthetic Parafinic Kerosene) provenant aussi du procédé de synthèse F-T. Ce kérosène a été fourni par l'Institut Français du Pétrole (IFPEN) et sa composition chimique est décrite dans le tableau IV.7. Les caractéristiques physico-chimiques de ce kérosène sont les suivantes : $C_{11,5}H_{24,41}$; masse molaire M = 162,41 g.mol^{-1} ; densité ρ = 0 ,757 g.cm^{-3} ; rapport H/C = 2,12 ; indice de cétane CN = 45,45.

Tableau IV.7 : Composition chimique du SPK (IFP)

Famille chimique	% massique	Espèces principales
n-paraffines	19,63	n-décane n-undécane n-dodécane n-tetradécane
iso-paraffines	79,88	méthyldodécane>méthyldécane>méthylnonane
aromatiques	0,49	C_7-C_{10}

Ce kérosène synthétique paraffinique a déjà été étudié et modélisé dans une étude précédente par un mélange composé de n-décane, d'iso-octane et de n-propylbenzène pour représenter les trois différentes familles chimiques présentes dans ce carburant [13]. Les proportions de chacun de ces constituants étaient : 54,2% n-décane ; 45,3% iso-octane ; 0,5% n-propylbenzène. Ce mélange avait pour formule globale $C_{8,99}H_{19,93}$. Or pour 1000 ppm de kérosène injectés, 11500 ppm de carbone étaient introduit dans le réacteur. Il a donc fallu introduire 1281 ppm de ce mélange modèle pour obtenir la même quantité de carbone qu'avec le kérosène synthétique. Ce modèle a principalement été développé de façon à faire correspondre les caractéristiques physico-chimiques du mélange avec celles du kérosène, avec notamment l'indice de cétane de ces deux carburants en regard de leur réactivité. Cependant, on constante une quantité d'isobutène formé par le mélange modèle très largement surestimée par rapport au kérosène.

Nous avons décidé dans un premier temps de développer un nouveau mélange modèle sans iso-octane. La part des iso-alcanes du kérosène de synthèse est représentée dans ce

modèle par un mélange de 2-méthylheptane et de 3-méthylheptane. Les proportions des autres composés ont été ajustées pour correspondre à la composition initiale du kérosène donnée par l'IFPEN. Les fractions massiques de chacun des composés sont donc : 19,5% n-décane ; 60% 2-méthylheptane ; 20% 3-méthylheptane ; 0,5% n-propylbenzène, avec pour formule chimique $C_{8,33}H_{18,62}$. La quantité nécessaire de ce mélange pour obtenir la même quantité de carbone qu'avec le GtL est de 1380 ppm. Cependant, le mélange de ces deux iso-alcanes, beaucoup plus réactifs que l'iso-octane, fait augmenter l'indice de cétane à 55. Le mélange se retrouve donc légèrement trop réactif par rapport au kérosène, ce qui se voit sur le profil de l'eau ou du formaldéhyde. De plus, la grande quantité de 2-méthylheptane dans le mélange engendre une forte surestimation de la quantité de 1-pentène formée.

Un dernier mélange modèle a été testé contenant les trois différents iso-alcanes disponibles dans le mécanisme, à savoir du 2-méthylheptane, du 3-méthylheptane, ainsi qu'une faible fraction d'iso-octane afin de légèrement faire baisser la réactivité du mélange. Les proportions de ce mélange sont détaillées dans le tableau IV.8. Ce mélange a pour formule brute $C_{8,33}H_{18,62}$, donc de façon à pouvoir comparer les données obtenues avec celles du kérosène synthétique, 1380 ppm de celui-ci sont nécessaire. Ce nouveau mélange possède un indice de cétane calculé de 49 [30], un rapport H/C de 2,24, une densité de 0,707 $g.cm^{-3}$ et une masse molaire de (8,33*12+18,62)*1,380 = 163,64 $g.mol^{-1}$. Les caractéristiques physico-chimiques de ce mélange sont donc proches de celles du SPK. Cependant, l'augmentation de la proportion de 3-méthylheptane a eu pour conséquence une légère surestimation du 1-butène et de la 2-butanone.

Tableau IV.8 : Composition du mélange utilisé pour la simulation de l'oxydation du SPK (IFP)

	formule chimique	**fraction massique (%)**	**fraction molaire (%)**	**concentration (ppm)**
n-décane	$C_{10}H_{22}$	19,5	16,3	225
iso-octane	C_8H_{18}	10	10,4	144
2-méthylheptane	C_8H_{18}	20	20,8	287
3-méthylheptane	C_8H_{18}	50	52	718
n-propylbenzène	C_9H_{12}	0,5	0,5	6

4.3 Conclusion

Un mécanisme cinétique détaillé a été développé pour modéliser l'oxydation de trois kérosènes de synthèse. Ce mécanisme comprend les sous-mécanismes du n-décane, de l'iso-octane, du n-propylcyclohexane, du n-propylbenzène, du 2-méthylheptane, du 3-méthylheptane, de la décaline et de la tétraline. Il nous a donc été possible de développer des mélanges modèles pouvant contenir jusqu'à 8 composés de façon à représenter au mieux l'oxydation de ces kérosènes, en se rapprochant au maximum de leur composition et des propriétés physico-chimiques de ceux-ci.

Cependant, même avec un mécanisme contenant un grand nombre de différents hydrocarbures, nous avons vu qu'il est difficile de trouver un modèle idéal pour satisfaire toutes les exigences.

La validation de ces mécanismes et sous-mécanismes cinétiques se fera par confrontation des simulations avec les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux, ce qui sera présenté au chapitre V et VII.

Références bibliographiques

[1] P. Glarborg, R. J. Kee, J. F. Grcar and J. A. Miller

PSR: A Fortran program for modelling well-stirred reactors, in SAND86-8209, 1986, Sandia National Laboratories: Livermore, CA

[2] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller

CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics, in SAND89-8009, 1989, Sandia National Laboratories: Livermore, CA

[3] S. Gordon and B. J. McBride

Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and Chapman-Jouguet detonations, NASA SP-273, 1971

[4] C. Muller, V. Michel, G. Scacchi and G. M. Come

THERGAS: A computer program for the evaluation of thermochemical data molecules and free radicals in the gas phase, Journal de Chimie Physique et Physico-Chimie Biologique, 1995, vol 92, pp. 1154-1178

[5] S. W. Benson

Thermochemical Kinetics, Second ed, 1976, New York: Wiley, Interscience

[6] C. W. Reynolds

The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN, Departement of Mechanical Engineering: Stanford University, 1986

[7] J. Troe

Fall-off curves of unimolecular reaction, Ber. Bunsenger. Phys. Chem., 1974, vol. 78, p. 478-485.

[8] P. Dagaut, A. El Bakali and A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate mode fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

[9] C. Guéret

Elaboration d'un modèle cinétique pour l'oxydation du kérosène et d'hydrocarbures représentatifs, Thèse, Université d'Orléans, 1989

[10] P. Dagaut, M. Cathonnet

The ignition, oxidation and combustion of kerosene: a review of experimental and kinetic modeling, Progress in Energy and Combustion Science, 2006, vol. 32, pp. 48-92.

[11] P. Dagaut and S. Gail

Kinetics of gas turbine liquid fuels combustion: Jet-A1 and biokerosene, Proceedings of the ASME Turbo Expo, 2007, vol. 2

[12] P. Dagaut and S. Gail

Chemical kinetic study of the effect of a biofuel additive on jet-A1 combustion, The Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3992-4000

[13] A. Mzé-Ahmed, K. Hadj-Ali, P. Diévart, P. Dagaut

Kinetics of oxidation of a synthetic jet fuel in a jet-stirred reactor: experimental and modeling study, Energy & Fuels, 2010, vol. 24, pp. 4904-4911

[14] A. Mzé Ahmed

Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants-modèles - Formation de polluants, Thèse, Université d'Orléans 2011

[15] A. Mzé-Ahmed, P. Dagaut, K. Hadj-Ali, G. Dayma, T. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, C. Naumann, U Riedel

Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study, Energy & Fuels, 2012, vol. 26, pp. 6070–6079

[16] P. Dagaut, F. Karsenty, G. Dayma, P. Diévart, K. Hadj-Ali, A. Mzé-Ahmed, M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, T. Kathrotia, T. Kick, C. Naumann, U Riedel, L. Thomas

Experimental and Detailed Kinetic Model for the Oxidation of a Gas to Liquid (GtL) Jet Fuel, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 835-847

[17] P. Diévart

Oxydation en milieu ultra-pauvre de carburants types gazoles. Étude expérimentale en réacteur auto-agité et modélisation, Thèse, Université d'Orléans 2008

[18] P. Dagaut and C. Togbé

Experimental and Modeling study of the kinetics of oxidation of ethanol-gasoline Surrogate Mixtures (E85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor, Energy & Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3499-3505

[19] C. Togbé, A. Mzé-Ahmed and P. Dagaut

Experimental and Modeling Study of the Kinetics of Oxidation of Methanol-Gasoline Surrogate Mixtures (M85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor, Energy & Fuels, 2009, vol. 23, pp. 1936-1941

[20] C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, A. Modak, E. Meeks, Y. L. Wang, Q. Feng, T. T. Tsotsis

Detailed chemical kinetic mechanism for surrogates of alternative jet fuels, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 434-445

[21] K. Mati

Cinétique de combustion du gazole. Etude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[22] P. Dagaut

On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel, Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, vol. 4, pp. 2079-2094

[23] Y. Fenard, P. Dagaut, G. Dayma, F. Halter, F. Foucher

Experimental and kinetic modeling study of trans-2-butene oxidation in a jet-stirred reactor and a combustion bomb, Proceedings of the Combustion Institute, 2014, vol. 35

[24] S. Touchard

Construction et validation de modèles cinétiques détaillés pour la combustion de mélanges modèles des essences, Thèse, Université de Nancy, 2005

[25] P. Dagaut, A. Ristori, A. Frassoldati, T. Faravelli, G. Dayma, E. Ranzi

Experimental and semi-detailed kinetic modeling study of decalin oxidation and pyrolysis over a wide range of conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 2012, vol. 34, pp. 289-296

[26] P. Dagaut, A. Ristori, A. Frassoldati, T. Faravelli, G. Dayma, and E. Ranzi

Experimental Study of Tetralin Oxidation and Kinetic Modeling of its Pyrolysis and Oxidation, Energy & Fuels, 2013, vol. 27, pp. 1576–1585

[27] S. M. Sarathy, C. Yeung, C. K .Westbrook, W. J. Pitz, M. Mehl, M. J. Thomson

An experimental and kinetic modeling study of n-octane and 2-methylheptane in an opposed-flow diffusion flame, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp.1277-1287

[28] S. M. Sarathy, C. K. Westbrook, M. Mehl, W. J. Pitz, C. Togbé, P. Dagaut, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger, U. Niemann, K. Seshadri, P. S. Veloo, C. Ji, F. N. Egolfopoulos, T. Lu,

Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C7 to C20, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 2338-2357

[29] F. Karsenty, S. M. Sarathy, C. Togbé, C. K. Westbrook, G. Dayma, P. Dagaut, M. Mehl, W. J. Pitz

Experimental and Kinetic Modeling Study of 3-Methylheptane in a Jet-Stirred Reactor, Energy & Fuels, 2012, vol.26, pp. 4680–4689

[30] M. J. Murphy, J. D. Taylor, R. L. McCormick

Compendium of Experimental Cetane Number Data, NREL Final report, 2004, SR-540-36805

Chapitre V

Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de composés purs

5 Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de composés purs 137

5.1 Résultats expérimentaux en réacteur auto-agité 137

5.1.1 Oxydation du 3-méthylheptane 138

5.1.1.1 Conditions expérimentales 138

5.1.1.2 Résultats expérimentaux 139

5.1.2 Oxydation du 2,5-diméthylhexane 143

5.1.2.1 Conditions expérimentales 144

5.1.2.2 Résultats expérimentaux 144

5.1.3 Oxydation du 2-méthylnonane 149

5.1.3.1 Conditions expérimentales 149

5.1.3.2 Résultats expérimentaux 150

5.1.4 Comparaison de l'oxydation des iso-paraffines 154

5.2 Modélisation de l'oxydation des composés purs en réacteur auto-agité et validation du modèle 157

5.2.1 Modélisation de l'oxydation du n-décane 157

5.2.2 Modélisation de l'oxydation de l'iso-octane 159

5.2.3 Modélisation de l'oxydation de n-propylcyclohexane 161

5.2.4 Modélisation de l'oxydation de n-propylbenzène 162

5.2.5 Modélisation de l'oxydation de 2-méthylheptane 164

5.2.6 Modélisation de l'oxydation de 3-méthylheptane 165

5.2.7 Modélisation de l'oxydation de la décaline 167

5.2.8 Modélisation de l'oxydation de la tétraline 169

5.3 Modélisation de délais d'auto-inflammation de composés purs et validation du modèle 170

5.3.1 Simulation des délais d'auto-inflammation du n-décane 171

5.3.2 Simulation des délais d'auto-inflammation du n-propylcyclohexane 171

5.3.3 Simulation des délais d'auto-inflammation du 3-méthylheptane 172

5.3.4 Simulation des délais d'auto-inflammation de la décaline 173

5.4 Conclusion 174

Références bibliographiques 176

5 Etude expérimentale et modélisation de l'oxydation de composés purs

Ce chapitre présente dans une première partie les résultats expérimentaux obtenus en réacteur parfaitement agité pour trois iso-paraffines. Puis, dans une seconde partie, ces résultats expérimentaux, complétés par d'autres issus de la littérature, ont été confrontés à des simulations menées avec le mécanisme développé dans ce travail et contenant des sous-mécanismes d'oxydation d'hydrocarbures appartenant à différentes familles chimiques (n-alcanes, iso-alcanes, naphtènes, naphténo-aromatiques, aromatiques). La confrontation des résultats expérimentaux et de modélisation a permis la validation du mécanisme avant l'extension de son utilisation pour modéliser l'oxydation de mélanges complexes.

5.1 Résultats expérimentaux en réacteur auto-agité

La première étape de ces travaux a porté sur la recherche d'un hydrocarbure représentatif des iso-alcanes présents dans un kérosène 100 % synthétique (GtL, CtL ou BtL). Les études menées par Mzé-Ahmed *et al.* en 2010 [1] et 2012 [2] ainsi que par Dagaut *et al.* en 2014 [3], ont montré que l'utilisation de l'iso-octane (2,2,4-triméthylpentane) à cette fin n'était pas appropriée en raison de sa structure trop ramifiée. Une série d'expériences ayant déjà été menées au laboratoire sur le 2-méthylheptane, nous avons décidé dans un premier temps de poursuivre avec les isomères de l'iso-octane, à savoir, le **3-méthylheptane** et le **2,5-diméthylhexane**. Dans un second temps nous avons décidé de mener une série d'expérience sur le **2-méthylnonane** de façon à se rapprocher de la longueur de chaîne moyenne des iso-alcanes se trouvant dans un kérosène de synthèse (~ C_{10}). Les expériences ont été effectuées en réacteur auto-agité à haute pression (10 atm), dans un large domaine de températures (530-1220 K) et de richesses (0,5 à 2).

5.1.1 Oxydation du 3-méthylheptane

Nous présentons ici les résultats expérimentaux obtenus lors de l'oxydation du 3-méthylheptane (Figure V.1) (C_8H_{18}, M = 114,23 $g.mol^{-1}$, ρ= 0.705 $g.cm^{-3}$) en réacteur parfaitement agité entre 530 et 1220 K, à haute pression (10 atm), pour trois richesses (0,5, 1 et 2) et pour un temps de passage constant de 0,7 s. Cette molécule est un isomère moins ramifié de l'iso-octane, utilisé jusqu'à maintenant pour représenter la famille des iso-alcanes dans un kérosène de synthèse. Le 3-méthylheptane n'a jamais été étudié dans ce cadre-là auparavant.

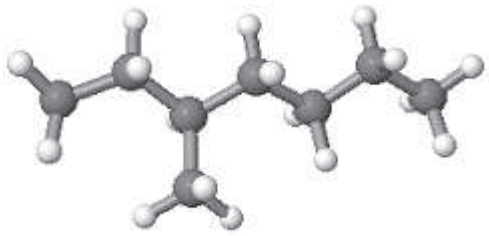


Figure V.1 : Représentation 3D du 3-méthylheptane

5.1.1.1 *Conditions expérimentales*

Les résultats expérimentaux ont été obtenus à l'aide du réacteur parfaitement agité développé à l'ICARE. Les expériences ont été menées dans les conditions expérimentales répertoriées dans le tableau V.1.

Tableau V.1 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du 3-méthylheptane en JSR

Richesse	X_{HC} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Pression (atm)	Temps de passage (s)	Température (K)
0,5	$1,0.10^{-3}$	$25,0.10^{-3}$	$9,740.10^{-1}$	10	0,7	530 - 1220
1	$1,0.10^{-3}$	$12,5.10^{-3}$	$9,865.10^{-1}$	10	0,7	530 – 1220
2	$1,0.10^{-3}$	$6,25.10^{-3}$	$9,9275.10^{-1}$	10	0,7	530 - 1220

5.1.1.2 *Résultats expérimentaux*

Les résultats obtenus sont présentés sur les figures V.2, V.3 et V.4. Ce sont les profils des fractions molaires des réactifs, produits et intermédiaires stables, en fonction de la température. Nous avons commencé les expériences avec le 3-méthylheptane en réacteur auto-agité par la richesse la plus faible qui nous intéressait, à savoir 0,5. Dans cette condition, une quantité d'oxygène supérieure à la stoechiométrie est disponible, c'est donc un mélange pauvre. Les expériences ont ensuite été menées à la stoechiométrie, puis pour un mélange riche. Nous avons pu remarquer que le 3-méthylheptane réagissait à basse température et présentait une flamme froide.

Au cours de l'oxydation du 3-méthylheptane, nous avons pu identifier de nombreuses espèces, de tailles et de familles chimiques différentes, grâce aux divers appareils d'analyse. Parmi ces produits, on remarque que le monoxyde de carbone (CO), le dioxyde de carbone (CO_2) et l'eau (H_2O) sont les espèces majoritaires. L'éthylène (C_2H_4), le formaldéhyde (CH_2O), le méthane (CH_4), le propène (C_3H_6), l'acétaldéhyde (C_2H_4O) et l'hydrogène (H_2) sont de même produits dans des quantités importantes. Dans le domaine de haute température l'éthylène est l'hydrocarbure imbrûlé majoritaire formé. Le CO reste l'espèce oxygénée principale produite, suivi du formaldéhyde. D'autres espèces ont pu être détectées dans des concentrations plus faibles comme l'éthane (C_2H_6), des alcènes légers dont le but-1-ène (C_4H_8-1), l'isobutène (i-C_4H_8) et le buta-1,3-diène (1,3-C_4H_6), mais aussi des alcènes plus lourds comme le 2-méthylbut-1-ène (C_5H_{10}), le 3-méthylpent-1-ène (C_6H_{12}), le hex-1-ène (C_6H_{12}-1) et le hex-2-ène (C_6H_{12}-2), l'acétylène (C_2H_2), certains aldéhydes comme le propanal (C_3H_6O) et le propén-2-al (C_3H_4O) et des cétones comme la butan-2-one (C_4H_8O) et l'acétone (C_3H_6O). Enfin, d'autres espèces ont pu être identifiées dans des proportions plus faibles mais non négligeables. Notamment, de nombreux alcènes lourds directement dérivés du carburant initial (3-méthylhept-1-ène ; 5-méthylehept-3-ène ; heptane 3-méthylène ; 5-méthylhept-2-ène ; etc.) et des éthers cycliques (2-étyl-2,5-diméyltetrahydrofurane, etc.) ont été détectés.

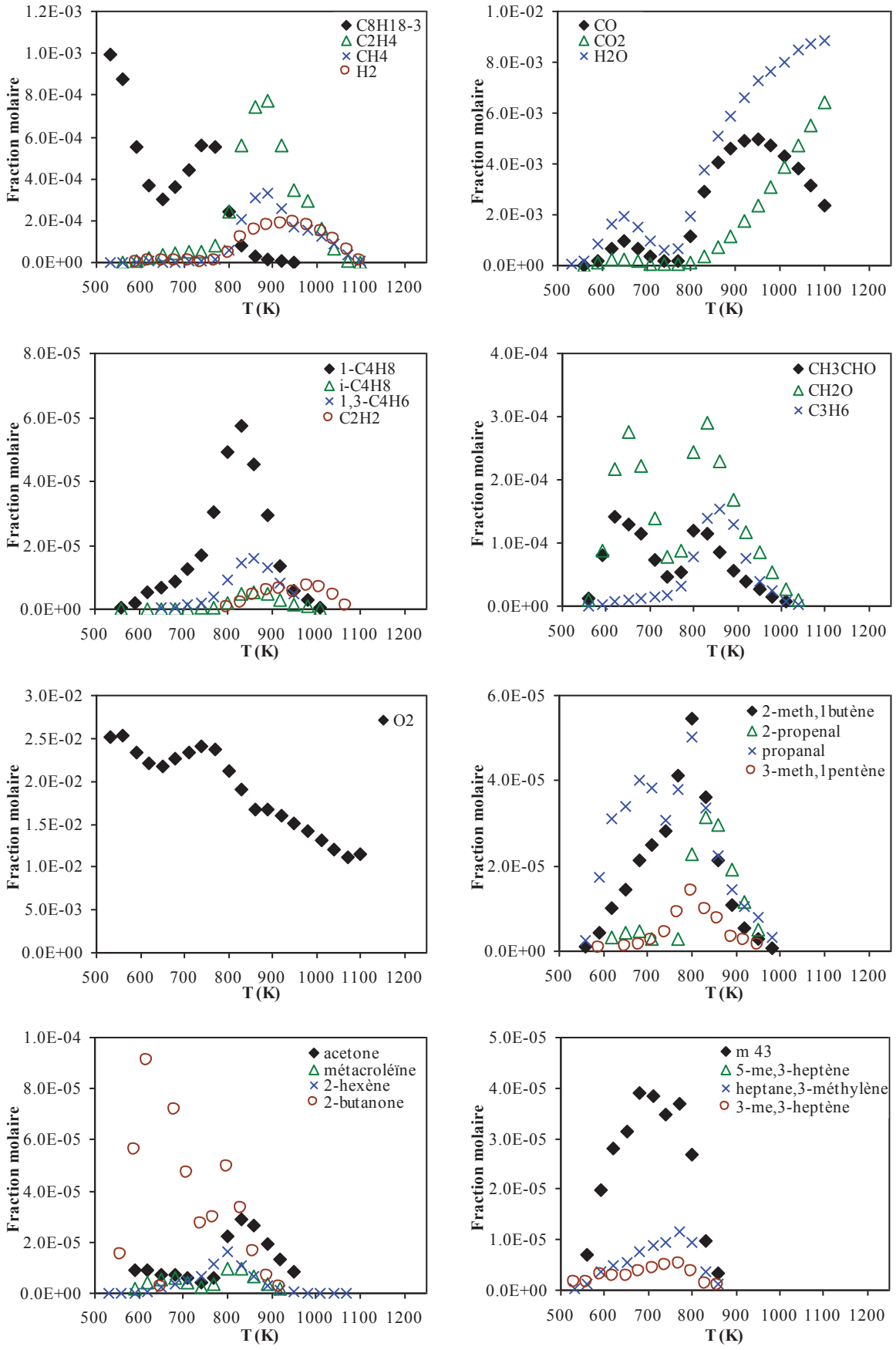


Figure V.2 : Oxydation du 3-méthylheptane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=0,5 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

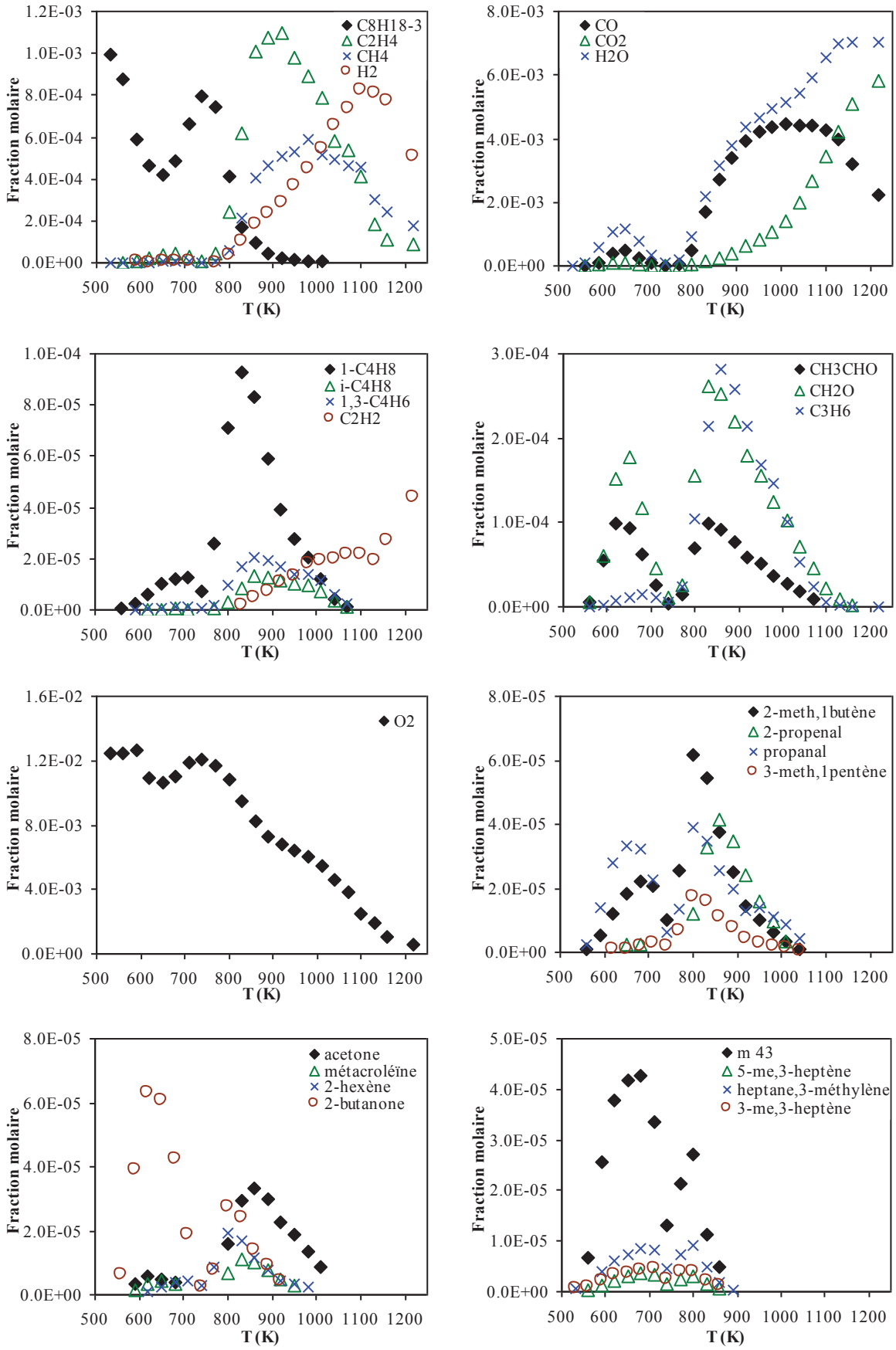


Figure V.3 : Oxydation du 3-méthylheptane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

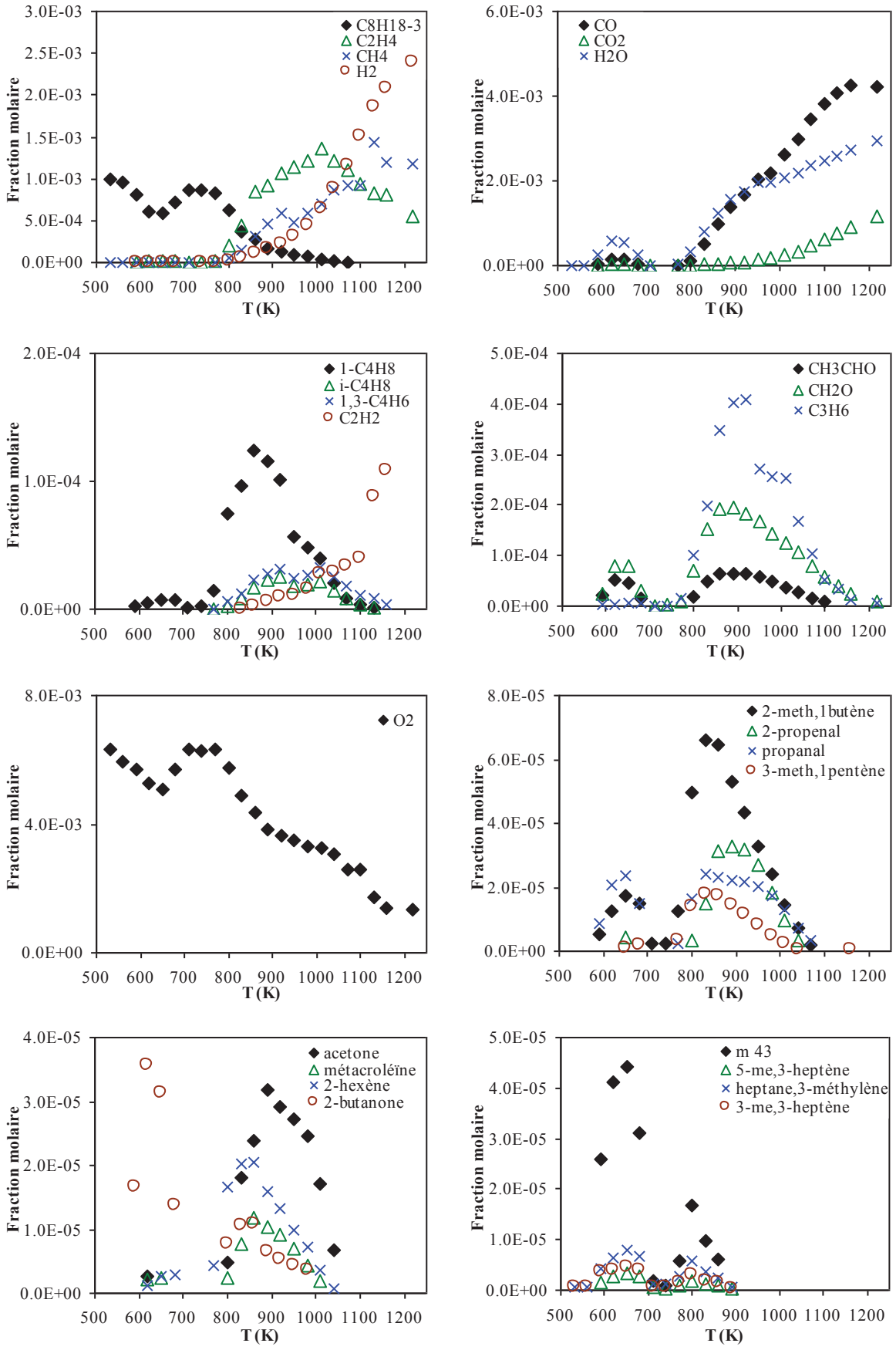


Figure V.4 : Oxydation du 3-méthylheptane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

Concernant l'hydrocarbure initial, on remarque que le 3-méthylheptane est fortement consommé à basse température (560 à 650 K). La zone de coefficient négatif de température est située entre 650 et 740 K et se caractérise par une forte diminution de la conversion alors que la température augmente. La baisse de réactivité globale du système est aussi très visible sur les profils de l'eau, de CO et de CO_2. Entre les trois différentes richesses, il est possible d'observer certaines variations sur les profils de quelques espèces, notamment le CO, le CO_2, l'eau, le CH_4, l'hydrogène, etc. Le profil du carburant ne varie quant à lui presque pas, mise à part dans la zone de coefficient négatif de température. Enfin, pour d'autres espèces, les profils montrent les mêmes tendances globales entre les richesses, mais diffèrent par leur intensité, c'est-à-dire qu'en fonction de la richesse, certaines espèces seront produites en plus grande quantité à une température donnée.

Dans le but de vérifier la bonne identification des composés et la cohérence des valeurs expérimentales obtenues, il est possible de faire un bilan carbone. Il s'agit de vérifier si la quantité de carbone injectée dans le réacteur et la quantité de carbone récupérée en sortie, après réaction, coïncident. Lors de cette expérience, nous avons injecté 1000 ppm de 3-méthylheptane (C_8H_{18}), soit 8000 ppm de carbone. En additionnant les quantités de tous les composés détectés avec les différentes techniques d'analyses, nous avons obtenu un bilan carbone correct à plus ou moins 15 % pour les 3 richesses à haute température.

Les données expérimentales obtenues pour le 3-méthylheptane en réacteur parfaitement agité ont pu être publiées en collaboration avec le « King Abdullah University of Science and Technology » et le « Lawrence Livermore National Laboratory » :
F. Karsenty, S. M. Sarathy, C. Togbé, C. K. Westbrook, G. Dayma, P. Dagaut, M. Mehl, W. J. Pitz, *Experimental and Kinetic Modeling Study of 3-Methylheptane in a Jet-Stirred Reactor*, 2012, Energy & Fuels, vol.26, pp. 4680–4689 [4].

5.1.2 Oxydation du 2,5-diméthylhexane

Les résultats expérimentaux obtenus lors de l'oxydation du 2,5-diméthylhexane (Figure V.5) (C_8H_{18}, M = 114,23 $g.mol^{-1}$, ρ= 0.694 $g.cm^{-3}$) en réacteur parfaitement agité entre 560 et 1190 K, à haute pression (10 atm), pour trois richesses différentes (0,5, 1 et 2) et

pour un temps de passage constant de 0,7 s sont présentés ici. Cette molécule, comme le 3-méthylheptane, fait partie de la famille des iso-alcanes et est un isomère de l'iso-octane. L'oxydation du 2,5-diméthylhexane n'a jamais été étudiée dans ce cadre là auparavant.

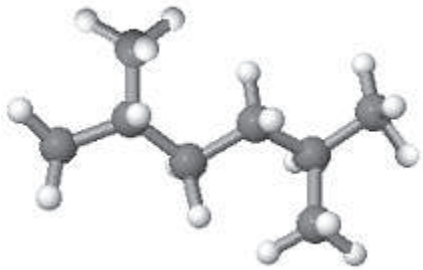


Figure V.5 : Représentation 3D du 2,5-diméthylhexane

5.1.2.1 *Conditions expérimentales*

Le réacteur parfaitement agité développé à l'ICARE a permis d'obtenir les résultats expérimentaux. Les expériences ont été conduites dans les conditions expérimentales répertoriées dans le tableau V.2.

Tableau V.2 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du 3-méthylheptane en JSR

Richesse	**X_{HC} initiale**	**X_{O2} initiale**	**X_{N2} initiale**	**Pression (atm)**	**Temps de passage (s)**	**Température (K)**
0,5	$1{,}0.10^{-3}$	$25{,}0.10^{-3}$	$9{,}740.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1190
1	$1{,}0.10^{-3}$	$12{,}5.10^{-3}$	$9{,}865.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1190
2	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}25.10^{-3}$	$9{,}9275.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1190

5.1.2.2 *Résultats expérimentaux*

Les profils des fractions molaires des réactifs, produits et intermédiaires stables en fonction de la température obtenus lors de l'oxydation du 2,5-diméthylhexane sont présentés sur les figures V.6, V.7 et V.8. Les expériences ont, de même que pour le 3-méthylheptane, été menées pour un mélange pauvre, un mélange riche et à la stoechiométrie.

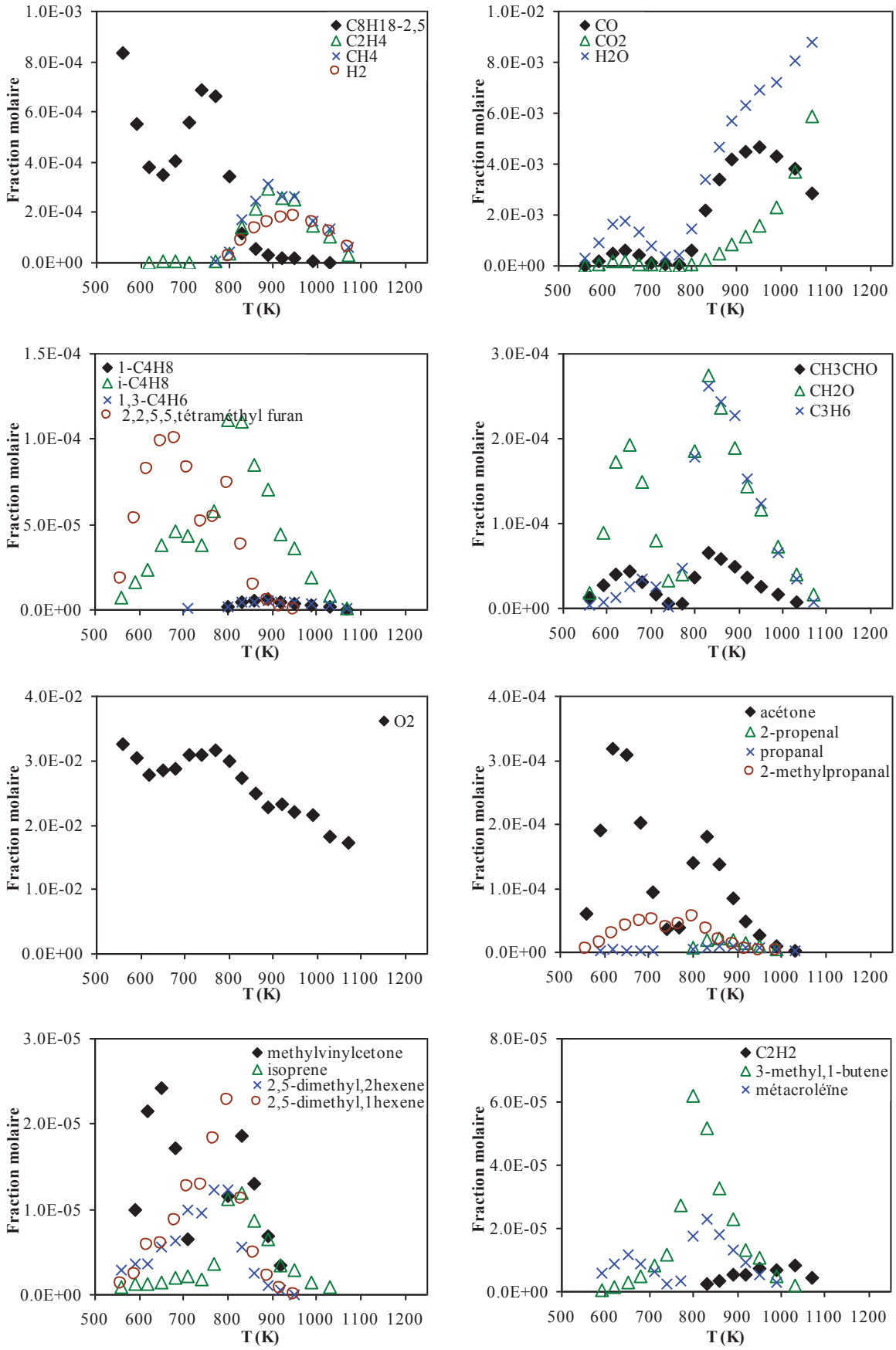


Figure V.6 : Oxydation du 2,5-diméthylhexane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=0,5 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

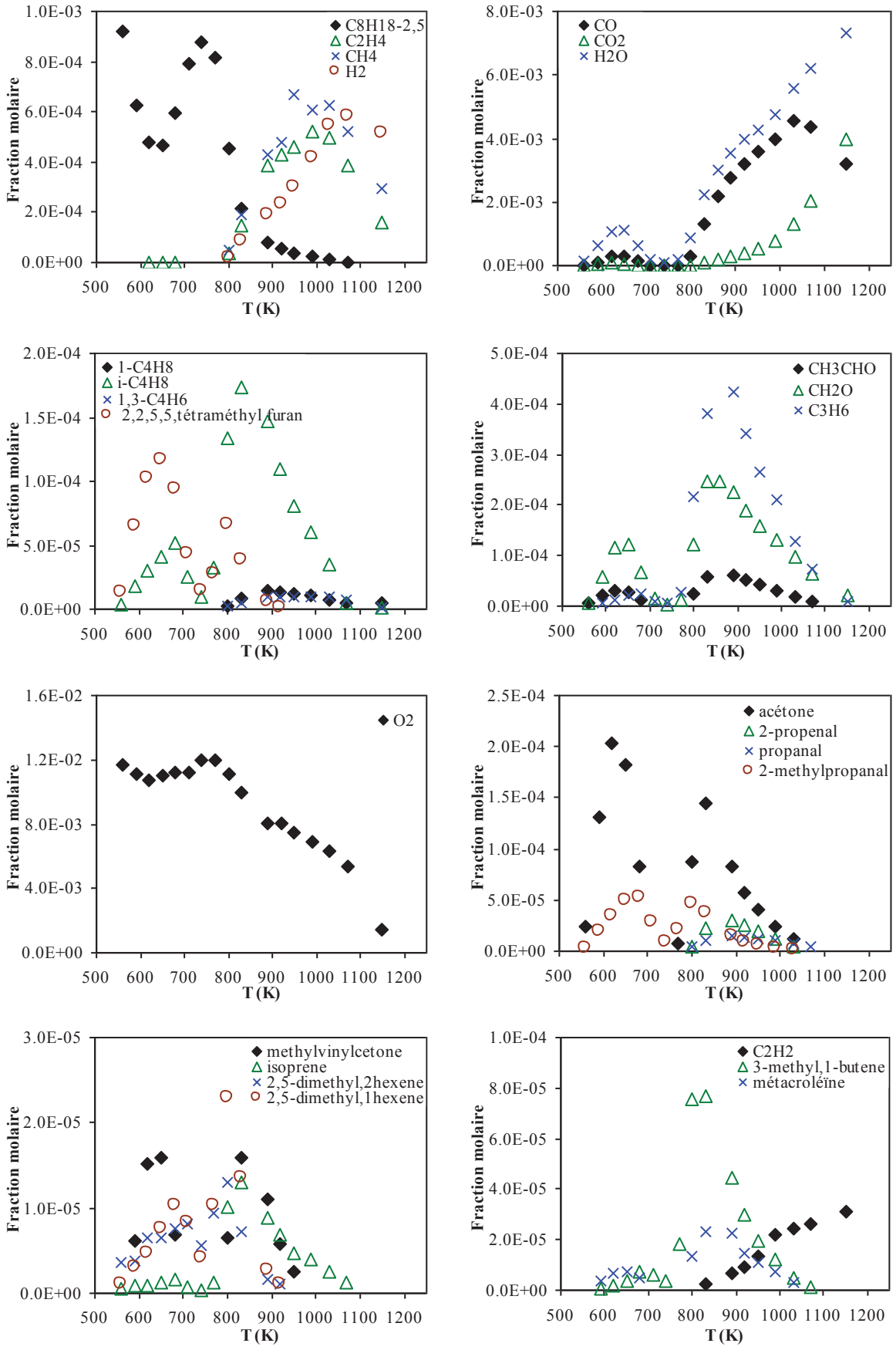


Figure V.7 : Oxydation du 2,5-diméthylhexane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

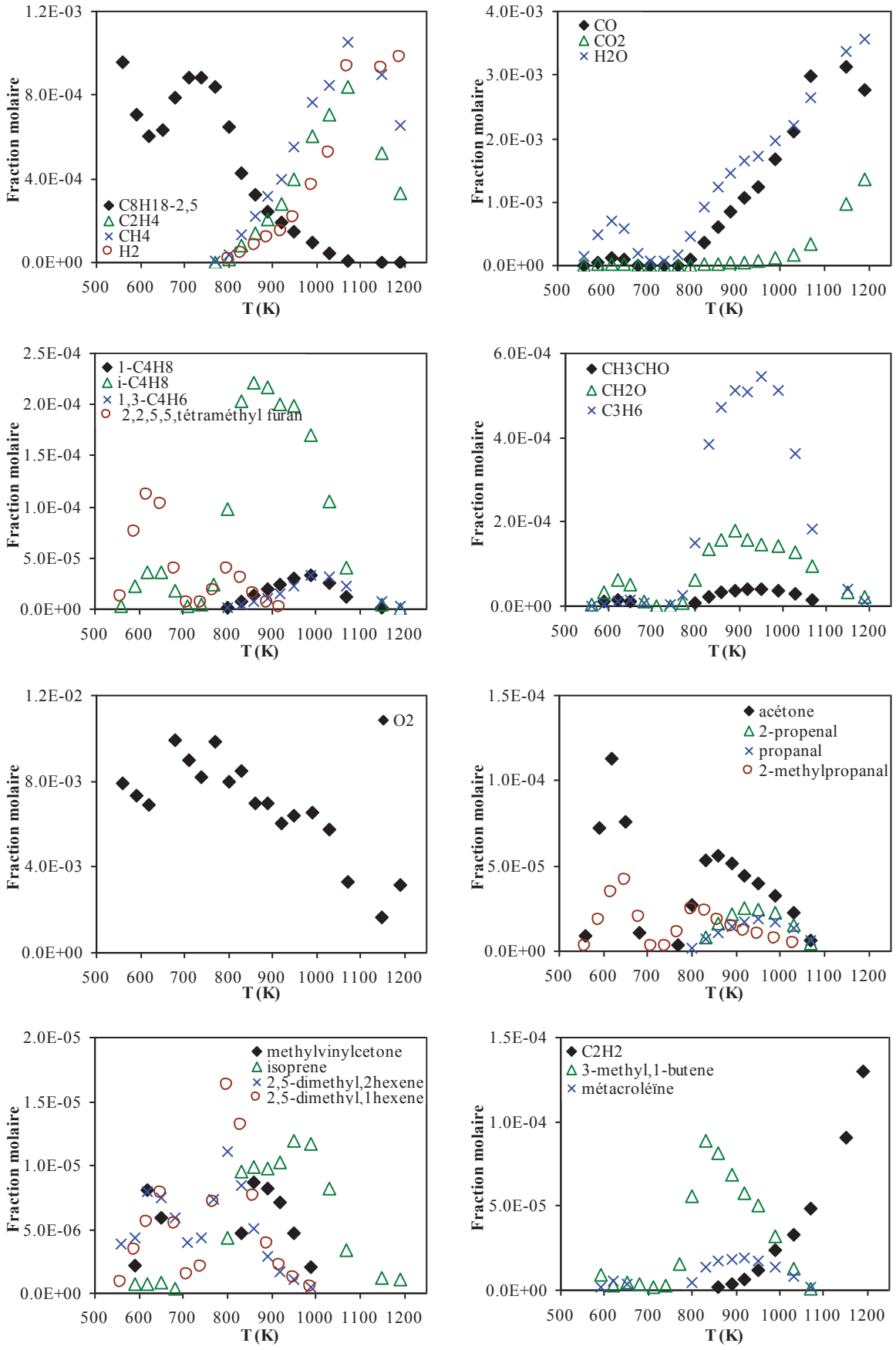


Figure V.8 : Oxydation du 2,5-diméthylhexane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

Nous avons pu identifier et mesurer de nombreuses espèces lors de l'oxydation du 2,5-diméthylhexane à l'aide des dispositifs d'analyse disponibles. Les espèces majoritaires sont les mêmes que celles mesurées lors de l'oxydation du 3-méthylheptane, à savoir du monoxyde de carbone, du dioxyde de carbone et de l'eau. Nous avons de plus aussi mesuré en quantités assez importantes de l'éthylène, du formaldéhyde, du méthane, du propène, de l'acétaldéhyde et de l'hydrogène. L'éthylène est aussi l'hydrocarbure imbrûlé majoritaire et le CO l'espèce oxygénée principale devant le formaldéhyde. De nombreux alcènes ont aussi pu être détectés comme le but-1-ène, l'isobutène, le cis et le trans but-2-ène (c2-C_4H_8 et t2-C_4H_8), l'acétylène et le buta-1,3-diène, mais aussi le 3-méthylbut-1-ène (C_5H_{10}), le 2-méthylbut-1,3-diène ou isoprène (C_5H_8) et les alcènes dérivés de la molécule initiale, comme le 2,5-diméthylhex-2-ène (C_8H_{16}), le 2,5-diméthylhex-1-ène (C_8H_{16}), etc. Quelques aldéhydes ont aussi été identifiés comme le propanal, le propén-2-al, le 2-méthylpropanal (C_4H_8O) et le 2-méthyl-2-propénal ou méthacroléine (C_4H_6O). Certaines cétones comme la 3-butène-2-one (C_4H_6O) et l'acétone ont été mesurées. Enfin quelques éthers cycliques ont pu être identifiés, notamment le 2,2,5,5-tétraméthyltétrahydrofuran ($C_8H_{16}O$) qui est largement majoritaire devant les autres.

En ce qui concerne l'hydrocarbure de départ, on remarque que le 2,5-diméthylhexane présente une combustion similaire à celle du 3-méthylheptane avec une flamme froide située entre 560 et 650 K, une zone de coefficient négatif de température entre 650 et 740 K et un zone de réactivité de haute température au-delà de 740 K. Entre les trois richesses, il est possible d'observer certaines variations sur les concentrations de certaines espèces comme le CO, le CO_2, l'eau, le CH_4, l'hydrogène, etc. Le profil du 2,5-diméthylhexane varie très peu, excepté dans la zone de coefficient négatif de température au sein de laquelle on peut voir quelques différences entre les richesses. Enfin, le bilan carbone sur ces expériences a montré une erreur de l'ordre de 15 %.

Entre le 2,5-diméthylhexane et le 3-méthylheptane, quelques différences ont pu être observées lors de leur oxydation. La première différence, très visible, est la quantité d'isobutène formée par ces carburants. En effet, le 3-méthylheptane forme surtout du 1-butène et très peu d'isobutène alors que le 2,5-diméthylhexane forme une très grande quantité d'isobutène mais peu de 1-butène. D'autres différences sont visibles sur la nature des produits minoritaires formés, directement liés à la géométrie de ces molécules comme le 2-méthylbut-1-ène et le 3-méthylpent-1-ène pour le 3-méthylheptane ou le 3-méthylbut-1-ène pour le 2,5-diméthyhexane.

Ces travaux ont aussi fait l'objet d'une publication en collaboration avec plusieurs laboratoires :

S. M. Sarathy, T. Javed, F. Karsenty, A. Heufer, W. Wang, S. Park, A. Elwardany, A. Farooq, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, M. A. Oehlschlaeger, G. Dayma, H. J. Curran, P. Dagaut, *A comprehensive combustion chemistry study of 2,5-dimethylhexane*, 2014, Combustion and Flame, vol.161 (6), pp. 1444–1459 [5].

5.1.3 Oxydation du 2-méthylnonane

Le troisième hydrocarbure étudié est le 2-méthylnonane (Figure V.9) ($C_{10}H_{22}$, M = 142,28 g.mol^{-1}, ρ= 0.726 g.cm^{-3}). Les résultats expérimentaux obtenus pour celui-ci en réacteur parfaitement agité entre 530 et 1220 K, à haute pression (10 atm), pour trois richesses différentes (0,6, 1 et 2) et pour un temps de passage constant de 0,7 s sont présentés ici. Cette molécule fait elle aussi partie de la famille des iso-alcanes, mais sa taille supérieure à celle de l'iso-octane. L'oxydation du 2-méthylnonane n'a jamais été étudiée dans ce cadre là auparavant.

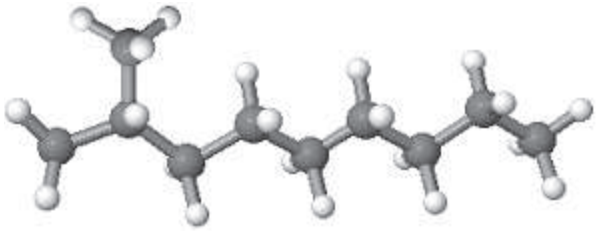


Figure V.9 : Représentation 3D du 2-méthylnonane

5.1.3.1 *Conditions expérimentales*

Les résultats expérimentaux ont été obtenus à l'aide du même réacteur parfaitement agité utilisé précédemment. Les expérimentations ont été effectuées dans les conditions expérimentales répertoriées dans le tableau V.3.

Tableau V.3 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du 2-méthylnonane en JSR

Richesse	X_{HC} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Pression (atm)	Temps de passage (s)	Température (K)
0,6	$1{,}0.10^{-3}$	$25{,}83.10^{-3}$	$9{,}7327.10^{-1}$	10	0,7	530 - 1220
1	$1{,}0.10^{-3}$	$15{,}5.10^{-3}$	$9{,}8350.10^{-1}$	10	0,7	530 – 1220
2	$1{,}0.10^{-3}$	$7{,}75.10^{-3}$	$9{,}9125.10^{-1}$	10	0,7	530 - 1220

5.1.3.2 *Résultats expérimentaux*

Les profils des fractions molaires des réactifs, produits et intermédiaires stables, en fonction de la température, obtenus lors de l'oxydation du 2-méthylnonane sont présentés sur les figures V.10, V.11 et V.12. Les expériences ont été menées pour un mélange pauvre, un mélange riche et à la stoechiométrie.

De nombreuses espèces, de tailles et de familles chimiques différentes, ont pu être identifiées et quantifiées lors de l'oxydation du 2-méthylnonane grâce aux dispositifs analytiques disponibles. Les espèces majoritaires mesurées sont les mêmes que celles identifiées lors de l'oxydation du 3-méthylheptane et du 2,5-diméthylhexane, à savoir le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone et l'eau. D'autres espèces ont aussi été mesurées en quantités importantes dont l'éthylène, le formaldéhyde, le méthane, le propène, l'acétaldéhyde et l'hydrogène. Le monoxyde de carbone est l'espèce oxygénée la plus présente devant le formaldéhyde, et l'hydrocarbure imbrûlé principal est l'éthylène. Nous avons observé une production importante de différents alcènes, mais aussi de quelques aldéhydes, cétones et aromatiques. Quelques produits spécifiques à l'oxydation du 2-méthylnonane ont aussi pu être identifiés, notamment des alcènes comme le 3-méthylbut-1-ène (C_5H_{10}) et le 5-méthylhex-1-ène (C_7H_{14}), mais aussi plusieurs éthers cycliques comme le 5-butyl-2,2-diméthyltétrahydrofuran ($C_{10}H_{20}O$), le cis et le trans 2-isopropyl-5-propyltétrahydrofuran ($C_{10}H_{20}O$), etc.

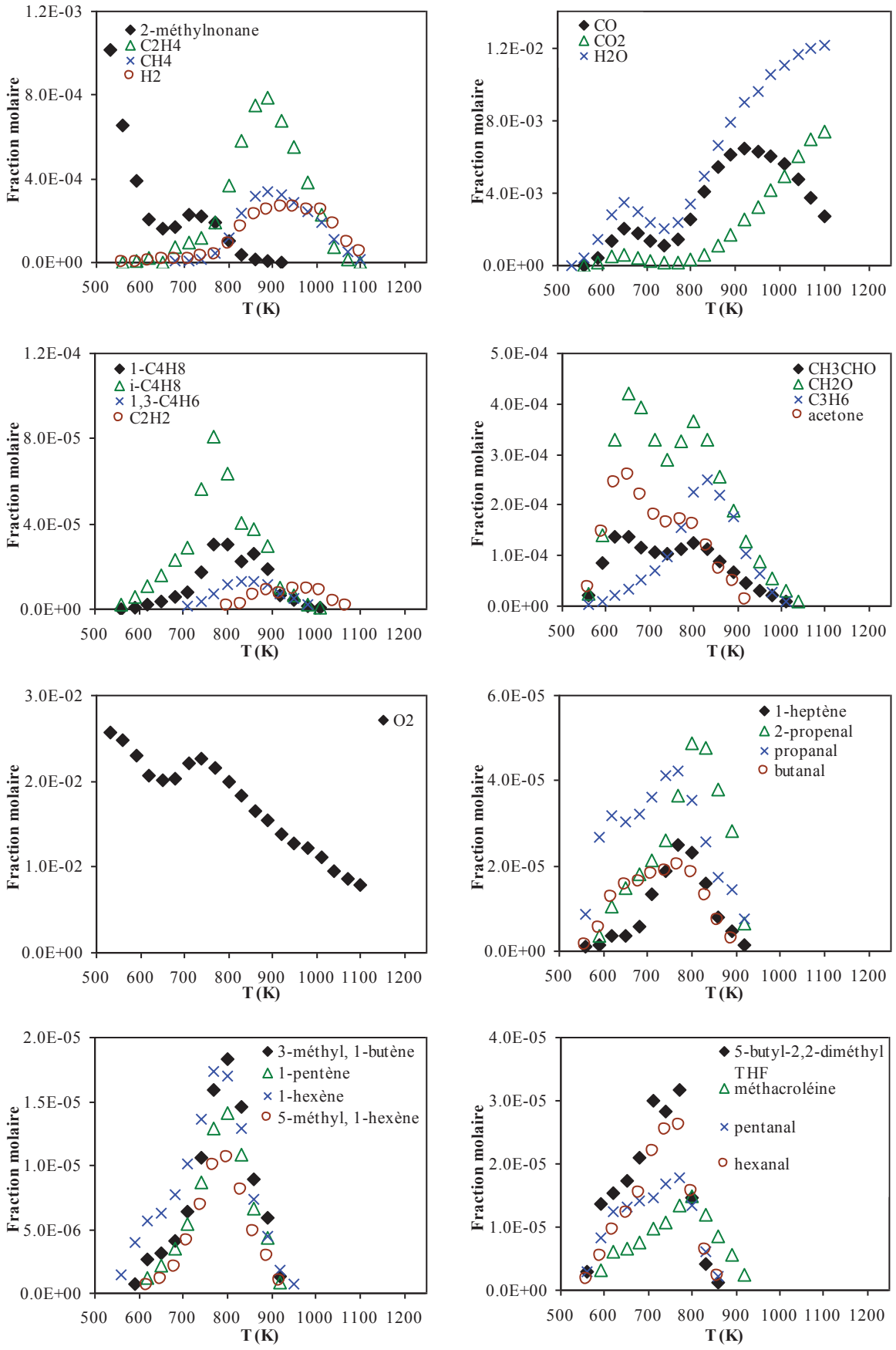


Figure V.10 : Oxydation du 2-méthylnonane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=0,5 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

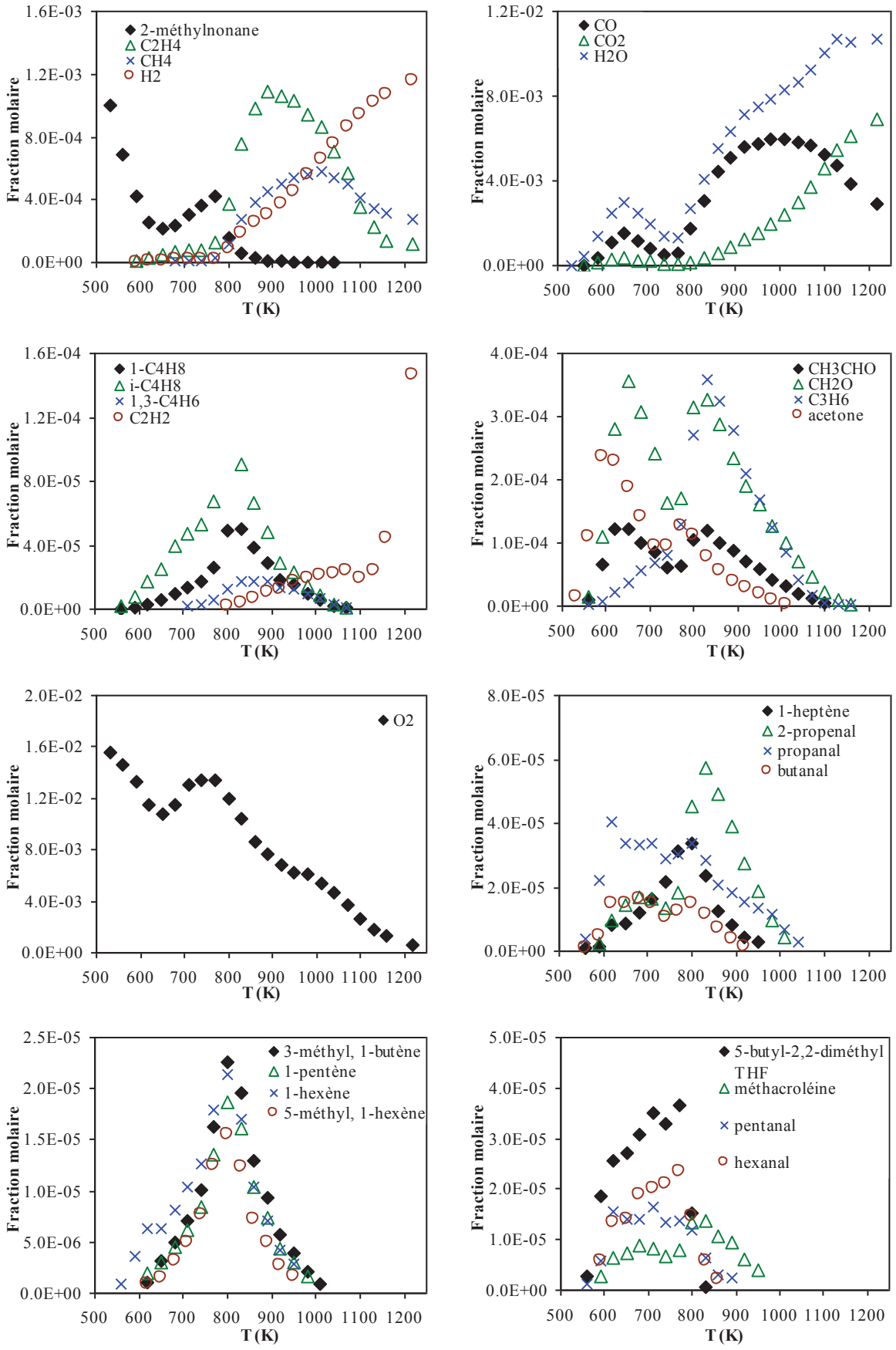


Figure V.11 : Oxydation du 2-méthylnonane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

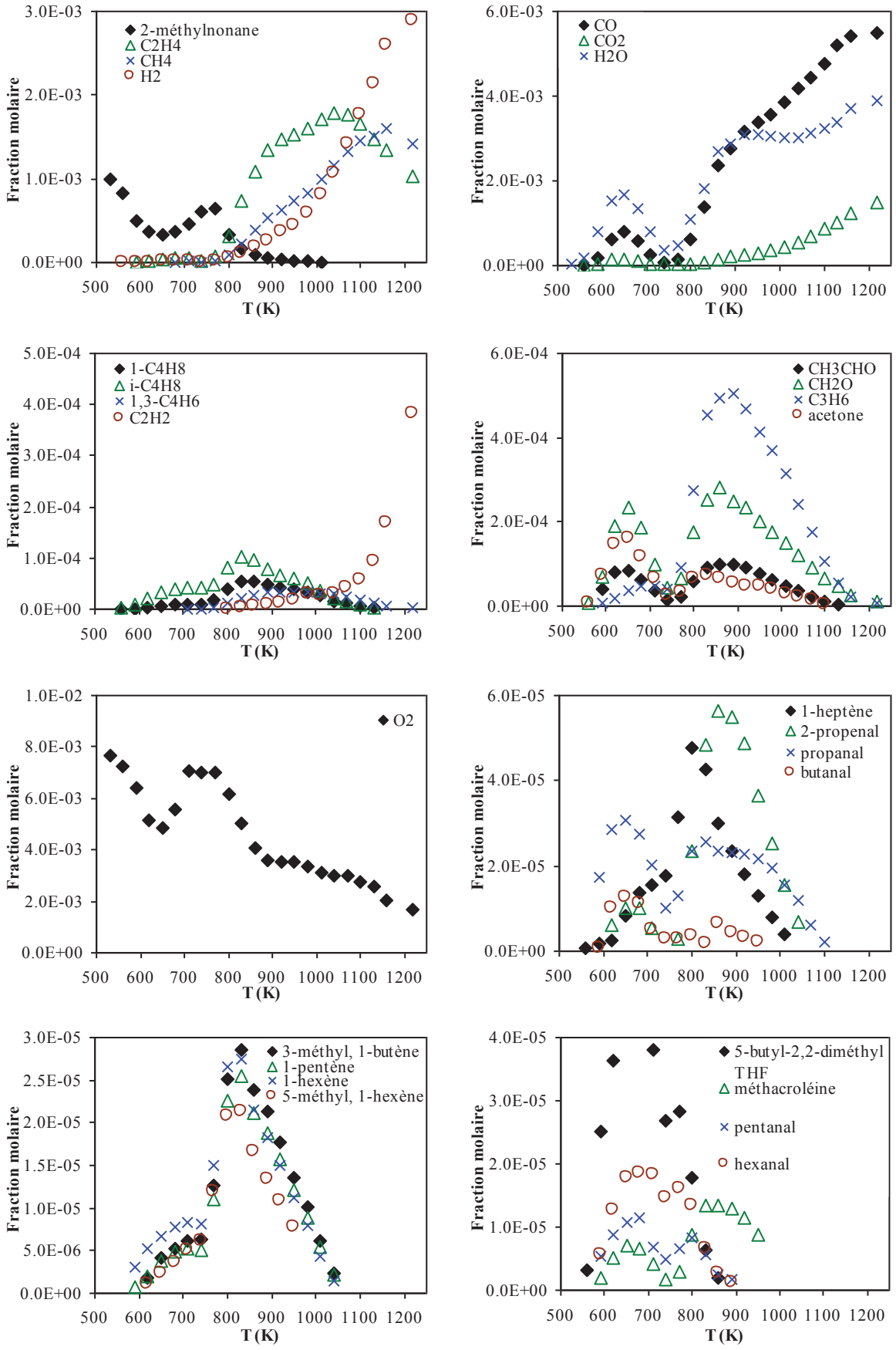


Figure V.12 : Oxydation du 2-méthylnonane en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

Le 2-méthylnonane présente une cinétique de combustion similaire à celles des deux iso-paraffines étudiées précédemment, avec cependant une réactivité légèrement plus élevée que ces deux dernières. Ceci est visible notamment sur les profils de l'eau, du CO, du CO_2, du formaldéhyde, etc. Cet hydrocarbure présente une flamme froide située entre 560 et 650 K, une zone de coefficient négatif de température située entre 650 et 740 K et une zone de réactivité de haute température au-delà de 740 K. Certaines variations entre les trois richesses sont visibles sur les profils de CO, de CO_2, de l'eau, du méthane, de l'hydrogène, etc. Le profil du 2-méthylnonane ne varie quant à lui quasiment pas entre les richesses, excepté dans la zone de coefficient négatif de température. Enfin, l'erreur sur le bilan de carbone effectué sur ces expériences est du même ordre de grandeur que pour les deux autres iso-paraffines étudiées, soit environ 15 %.

5.1.4 Comparaison de l'oxydation des iso-paraffines

Les résultats expérimentaux obtenus lors de cette étude pour l'oxydation du 3-méthylheptane, du 2,5-diméthylhexane et du 2-méthylnonane ont pu être comparés entre eux ainsi qu'à d'autres résultats expérimentaux obtenus antérieurement pour l'oxydation du 2-méthylheptane, un autre isomère de l'iso-octane. En effet, il a été intéressant de comparer ceux-ci afin d'observer l'influence de la position de la ramification, du nombre de ramification ainsi que de la longueur de la chaîne carbonée sur l'évolution des fractions molaires des différents produits et intermédiaires stables. Le 2-méthylnonane étant un $C_{10}H_{22}$ et les trois autres composés des C_8H_{18}, les données ont dans un premier temps dû être normalisées par rapport à la quantité de carbone injectée. En effet, lorsqu'on introduit 1000 ppm d'un composé en C_8H_{18}, 8000 ppm de carbone sont injectés. Les données du 2-méthylnonane doivent donc dans un premier temps être divisées par 1,25 pour obtenir la même quantité de carbone (sauf pour le profil de concentration de l'hydrocarbure).

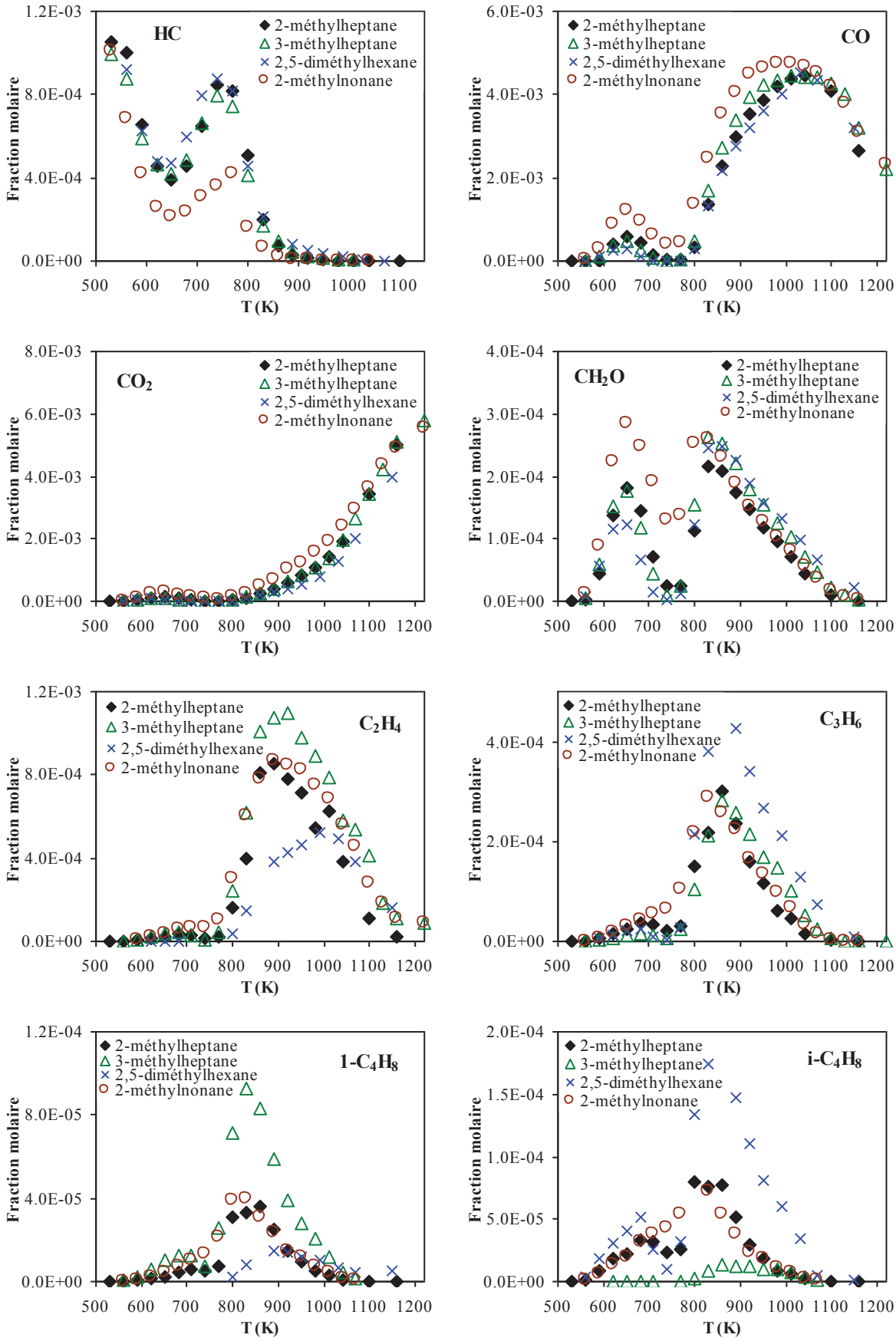
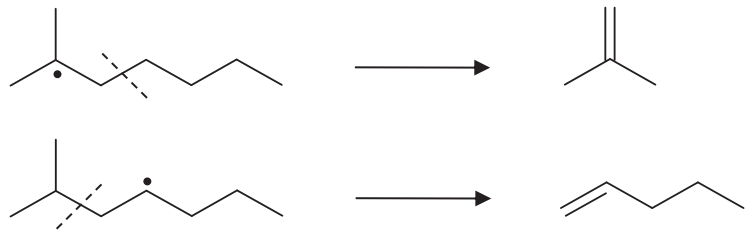


Figure V.13 : Comparaison de profils d'espèces pour l'oxydation du 3-méthylheptane, 2-méthylheptane, 2,5-diméthylhexane et 2-méthylnonane : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

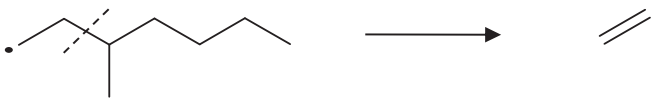
La figure V.13 présente la comparaison de quelques espèces formées au cours de l'oxydation de ces quatre iso-paraffines, ainsi que le profil de consommation de ces carburants. Il apparaît sur ces graphiques que le carburant est plus consommé pour une température donnée sur l'ensemble du domaine dans le cas du 2-méthylnonane, par rapport aux trois autres molécules. Cela montre une réactivité légèrement plus élevée pour cette molécule comportant une chaîne carbonée plus longue. Il est possible de vérifier cela sur les profils du CO, du CO_2 et du formaldéhyde (CH_2O), pour lesquels on observe une production plus importante de chacun de ces composés. Les trois autres iso-paraffines montrent des réactivités similaires en comparant leurs profils de consommation et les productions de CO, CO_2 et CH_2O, mais montrent certaines différences liées à la position de la ramification.

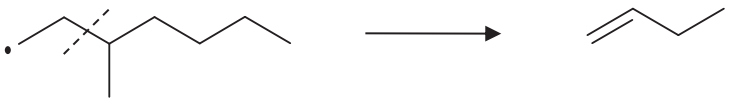
En effet, on peut voir sur les profils d'éthylène, de propène, de but-1-ène et d'isobutène certaines différences directement liées à la position et au degré de ramification. On remarque que le 3-méthylheptane forme plus d'éthylène et de but-1-ène et beaucoup moins d'isobutène que les trois autres carburants. Ceci vient de l'influence de la ramification, positionnée sur le carbone « 3 », sur les coupures de liaisons C-C (voir réactions ci-dessous). De plus, on peut voir une certaine similarité entre les profils du 2-méthylheptane et du 2-méthylnonane, ces deux molécules ayant une ramification sur le carbone « 2 ». Enfin, on remarque que le 2,5-diméthylhexane forme beaucoup plus d'isobutène et moins d'éthylène et de but-1-ène que les trois autres carburants. En effet, la double ramification de cette molécule sur le deuxième et l'avant dernier carbone de la chaîne favorise grandement la production d'isobutène, défavorisant celle de but-1-ène (voir réactions ci-dessous).

- *2-méthylheptane :*

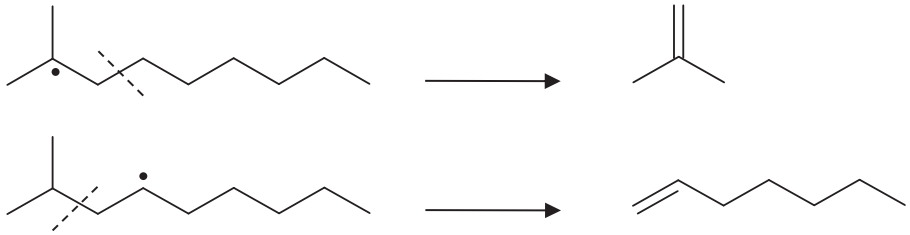


- *3-méthylheptane :*

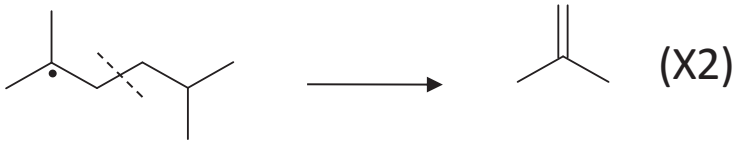




➢ *2-méthylnonane :*



➢ *2,5-diméthylhexane :*



5.2 Modélisation de l'oxydation des composés purs en réacteur auto-agité et validation du modèle

Le mécanisme développé au Chapitre IV est composé des sous-mécanismes d'oxydation du n-décane, de l'iso-octane, du n-propylcyclohexane, du 2-méthylheptane, du 3-méthylheptane, de la décaline, de la tétraline et du n-propylbenzène. Pour que ce mécanisme cinétique détaillé puisse être utilisé pour modéliser l'oxydation de kérosènes de synthèse (grâce à des mélanges de plusieurs hydrocarbures), il doit dans un premier temps être validé. Cette validation est effectuée par confrontation des données expérimentales et de modélisation de l'oxydation de chacune des molécules présentes dans le mécanisme.

5.2.1 Modélisation de l'oxydation du n-décane

Dans le but de valider le modèle cinétique développé pour l'oxydation des kérosènes de synthèse, nous avons comparé les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité

pour l'oxydation du n-décane avec les profils d'espèces simulés grâce au mécanisme cinétique proposé ici. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.14. Ces résultats expérimentaux proviennent d'études précédentes de Dagaut *et al.* [6, 7]. Ils ont été obtenus en réacteur parfaitement agité entre 550 et 1150 K, à haute pression (10 atm), à différentes richesses et pour un temps de passage constant de 1 s. Les résultats présentés ici sont ceux obtenus pour le mélange stoechiométrique.

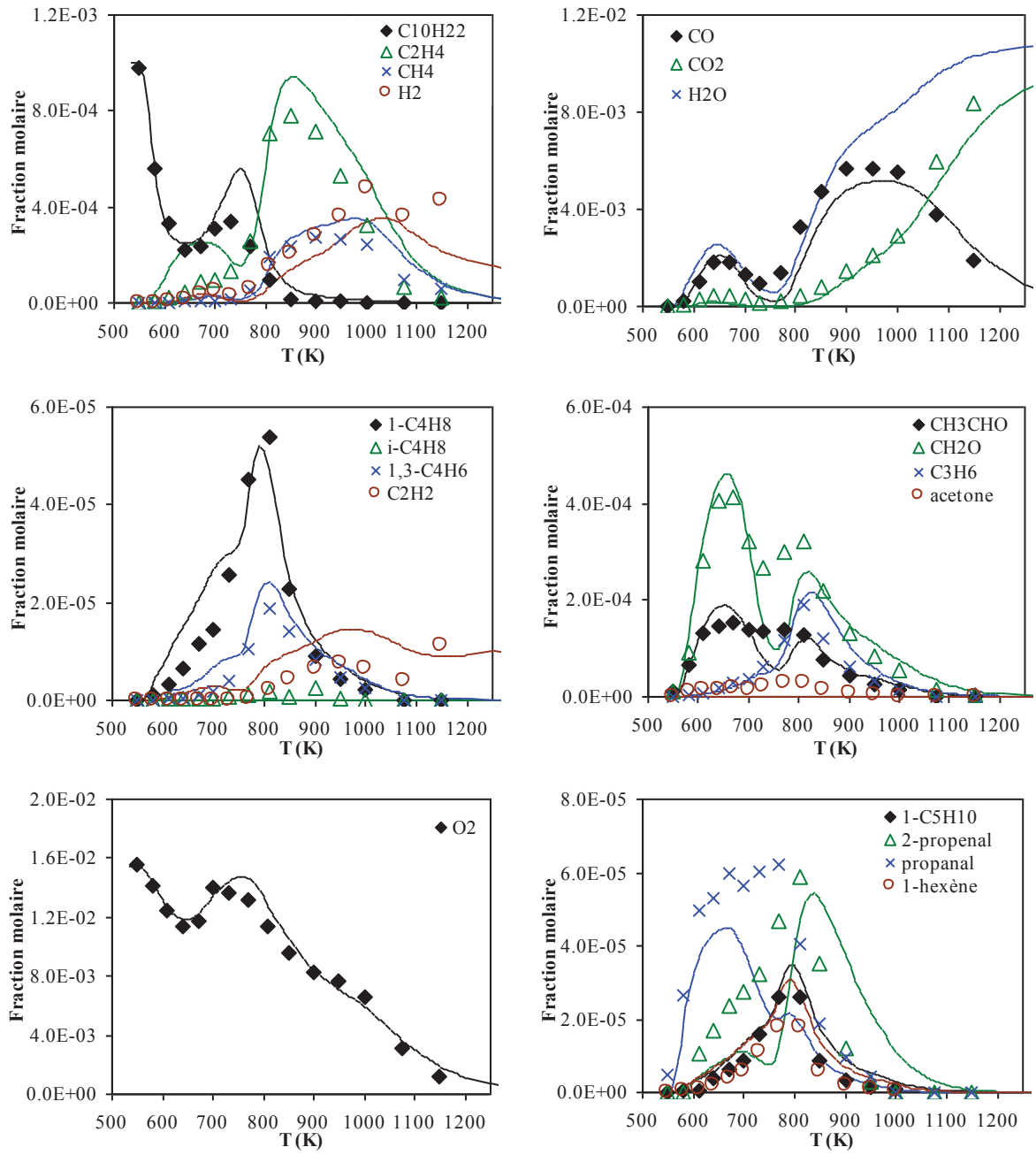


Figure V.14 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du n-décane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%

On constate que le modèle reproduit convenablement l'oxydation du n-décane sur l'ensemble de la gamme de températures et pour la plupart des espèces mesurées. Le modèle reproduit correctement le profil de consommation du n-décane, excepté dans la zone de coefficient négatif de température dans laquelle il sous-estime la consommation. Cette sous-estimation est aussi très visible sur les profils de plusieurs espèces comme le CO et le formaldéhyde pour lesquelles le modèle sous-estime la production dans cette zone de température. On constate aussi que le modèle surestime largement la production d'éthylène à basse température. Enfin on peut voir que le modèle sous-estime de façon très important la quantité de propanal sur tout le domaine de température.

Malgré quelques défauts, le modèle reproduit de façon satisfaisante l'oxydation du n-décane sur l'ensemble du domaine de température. On peut voir par comparaison avec les simulations des travaux de thèse de Diévart [8] que des améliorations y ont été apportées, notamment par Mzé-Ahmed [9] dans ses travaux de thèse ainsi qu'au cours de cette étude.

5.2.2 Modélisation de l'oxydation de l'iso-octane

Des résultats expérimentaux [10] obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation de l'iso-octane (2,2,4-triméthylpentane) ont été utilisés pour la validation du sous-mécanisme de cette molécule se trouvant dans le mécanisme global utilisé pour simuler l'oxydation de kérosènes de synthèse.

Ces résultats expérimentaux ont été obtenus en réacteur auto-agité entre 770 et 1190 K, à haute pression (10 atm), à différentes richesses et pour un temps de passage constant de 1 s. Les résultats présentés ici sont ceux obtenus pour le mélange stoechiométrique. La validation du sous-mécanisme de l'iso-octane a été faite par confrontation de ces résultats expérimentaux avec ceux obtenus par le calcul en utilisant le mécanisme développé au Chapitre IV. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.15. Le sous-mécanisme de l'iso-octane a été introduit dans le mécanise par Mzé-Ahmed [9] au cours de ses travaux de thèse dans le but de modéliser l'oxydation des iso-alcanes dans un kérosène de synthèse.

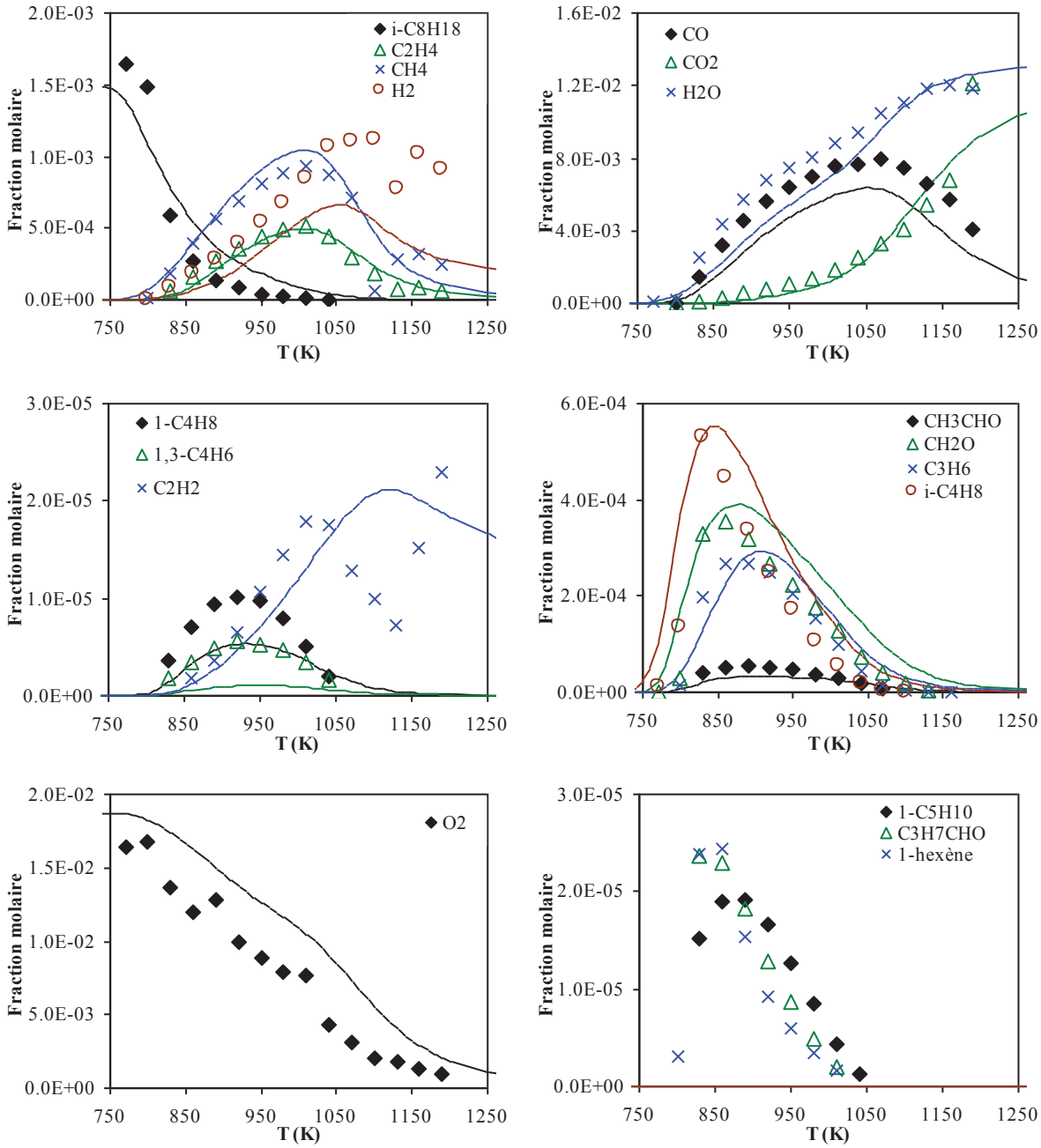


Figure V.15 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation de l'iso-octane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,15%

Le modèle reproduit de façon convenable l'oxydation de l'iso-octane sur l'ensemble de la gamme de température étudiée et pour la plupart des espèces mesurées. Le profil de consommation de l'iso-octane est légèrement surestimé (sous-estimation de la consommation de l'hydrocarbure) ce qui se voit aussi sur les profils d'autres espèces comme l'oxygène dont la consommation est de même sous-estimée, ou encore de CO et de l'eau dont la production est sous-estimée. Le modèle ne prévoit aucune formation de pent-1-ène, de hex-1-ène, ni de butanal alors que ces espèces ont été mesurées expérimentalement. La formation de but-1-ène

et de but-1,3-diène est sous-estimée, en revanche les profils d'éthylène, de méthane, d'acétaldéhyde, de formaldéhyde, de propène et d'isobutène sont bien reproduit par le modèle.

5.2.3 Modélisation de l'oxydation de n-propylcyclohexane

Des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation du n-propylcyclohexane ont été utilisés pour la validation de son sous-mécanisme d'oxydation. Ces résultats expérimentaux ont été obtenus par Mati. [11] et Diévart [8] en réacteur parfaitement agité entre 800 et 1120 K, à haute pression (10 atm), à différentes richesses et temps de passage. Ceux utilisés ici ont été obtenus pour un mélange stoechiométrique et un temps de passage de 0,5 s. Le sous-mécanisme du n-propylcyclohexane a été développé par Diévart [8] au cours de ses travaux de thèse pour modéliser la fraction des naphtènes dans un carburant conventionnel. Quelques modifications y ont été apportées lors de cette étude. La validation de ce sous-mécanisme a été faite par confrontation de ces résultats expérimentaux avec ceux obtenus par le calcul en utilisant le mécanisme cinétique du Chapitre IV. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.16.

On remarque que le modèle reproduit de manière assez satisfaisante les données expérimentales sur l'ensemble du domaine étudié. Cependant, on constate tout de même de nombreux écarts entre les profils expérimentaux et théoriques. On peut voir notamment que le modèle prévoit une consommation du n-propylcyclohexane trop brutale par rapport aux données expérimentales. On remarque que le profil de production de l'éthylène est surestimé par le modèle, de même que celui de l'hydrogène et de l'acétylène, ainsi que celui du pent-1-ène qui est très largement surestimé. Les profils de méthane, de CO et de CO_2 sont quant à eux bien reproduits par le modèle.

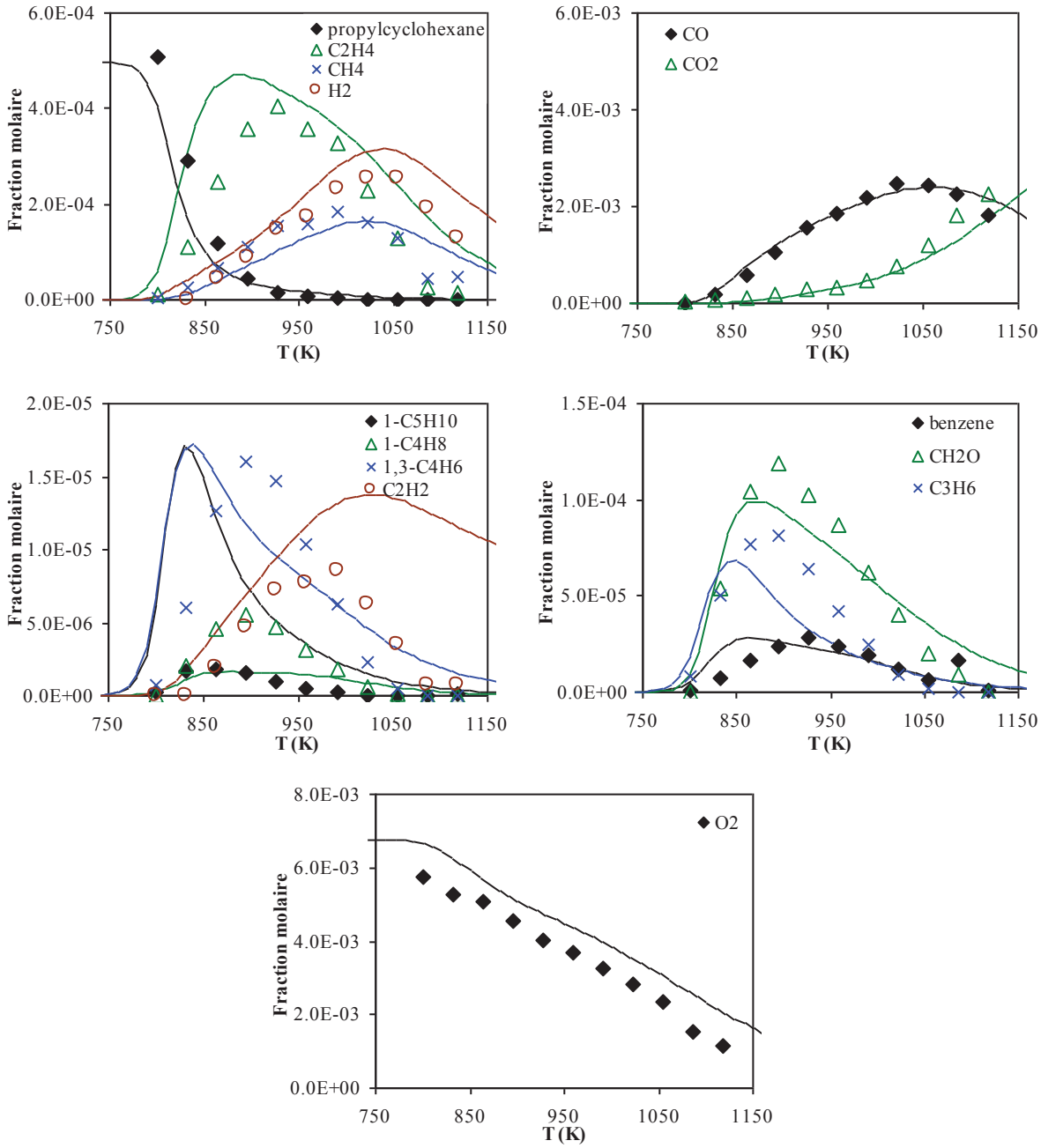


Figure V.16 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du n-propylcyclohexane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,5 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,05%

5.2.4 Modélisation de l'oxydation de n-propylbenzène

La validation du sous-mécanisme d'oxydation du n-propylbenzène a été réalisée en confrontant les profils d'espèces obtenues par le calcul, avec des données expérimentales obtenues en réacteur auto-agité. Ces résultats expérimentaux on été réalisés à pression atmosphérique, pour des températures comprises entre 950 et 1250 K, à différentes richesses

et pour un temps de passage constant de 0,07 s [12]. Le sous-mécanisme du n-propylbenzène a été intégré au mécanisme cinétique par Diévart [8] pour représenter la part des aromatiques dans un carburant conventionnel. Les résultats exposés ici sont ceux obtenus pour le mélange stoechiométrique. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.17.

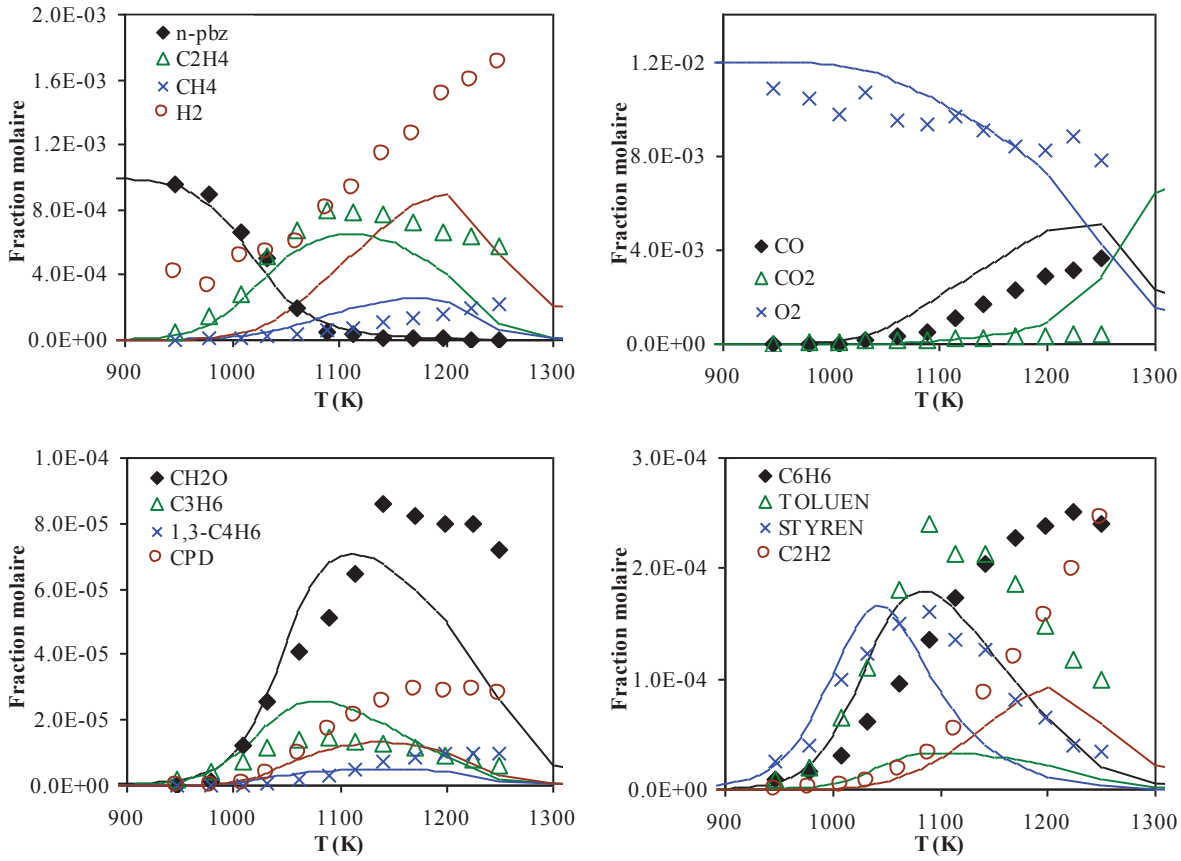


Figure V.17 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du n-propylbenzène en réacteur auto-agité: P=1 atm ; τ =0,07 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%

Sur la figure V.17, on peut voir que le modèle reproduit de façon acceptable les données expérimentales sur l'oxydation du n-propylbenzène. En effet, on remarque que le profil de consommation du carburant initial est correctement représenté, en revanche de nombreux écarts sont visibles sur les profils de formation de certains produits et intermédiaires stables. On peut voir notamment que le modèle sous-estime largement les quantités d'hydrogène et de toluène formées, ainsi que celle de formaldéhyde au-delà de 1100 K, alors qu'il surestime celles de CO et de propène. Enfin, on constate qu'il reproduit assez bien les profils d'éthylène et de méthane, ainsi que ceux du formaldéhyde et du styrène en dessous de 1100 K.

5.2.5 Modélisation de l'oxydation de 2-méthylheptane

Pour représenter les iso-paraffines dans un kérosène de synthèse, nous avons introduit le sous-mécanisme du 2-méthylheptane au mécanisme existant. Ce sous-mécanisme a été développé par Sarathy *et al.* [13]. Afin de valider l'insertion de ce sous-mécanisme dans notre modèle, nous avons comparé des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation du 2-méthylheptane avec les profils d'espèces simulées grâce à notre mécanisme. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.18. Les résultats expérimentaux ont été obtenus en réacteur parfaitement agité entre 530 et 1150 K, à haute pression (10 atm), à différentes richesses et pour un temps de passage constant de 0,7 s. Les résultats présentés ici sont ceux obtenus pour le mélange stoechiométrique.

On constate que le modèle reproduit convenablement l'oxydation du 2-méthylheptane sur l'ensemble de la gamme de température et pour la plupart des espèces mesurées. Le modèle reproduit assez bien le profil de consommation du 2-méthylheptane, mais il le surestime légèrement dans la flamme froide et le sous-estime dans la zone de coefficient négatif de température. Ceci est visible sur les profils de plusieurs espèces comme l'eau, le CO, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde, l'isobutène, etc. On constate que le modèle surestime la production d'acroléine (2-propénal) à haute température et sous-estime celle du propanal. On remarque aussi que le modèle représente correctement la production à basse température de l'éther cyclique majoritaire qui est le 5-éthyl-2-diméthyltétrahydrofuran, mais la sous-estime légèrement à haute température. Enfin on peut voir que le modèle reproduit très bien la quantité de CO, de CO_2, d'eau, d'éthylène, de formaldéhyde et d'oxygène sur tout le domaine de températures.

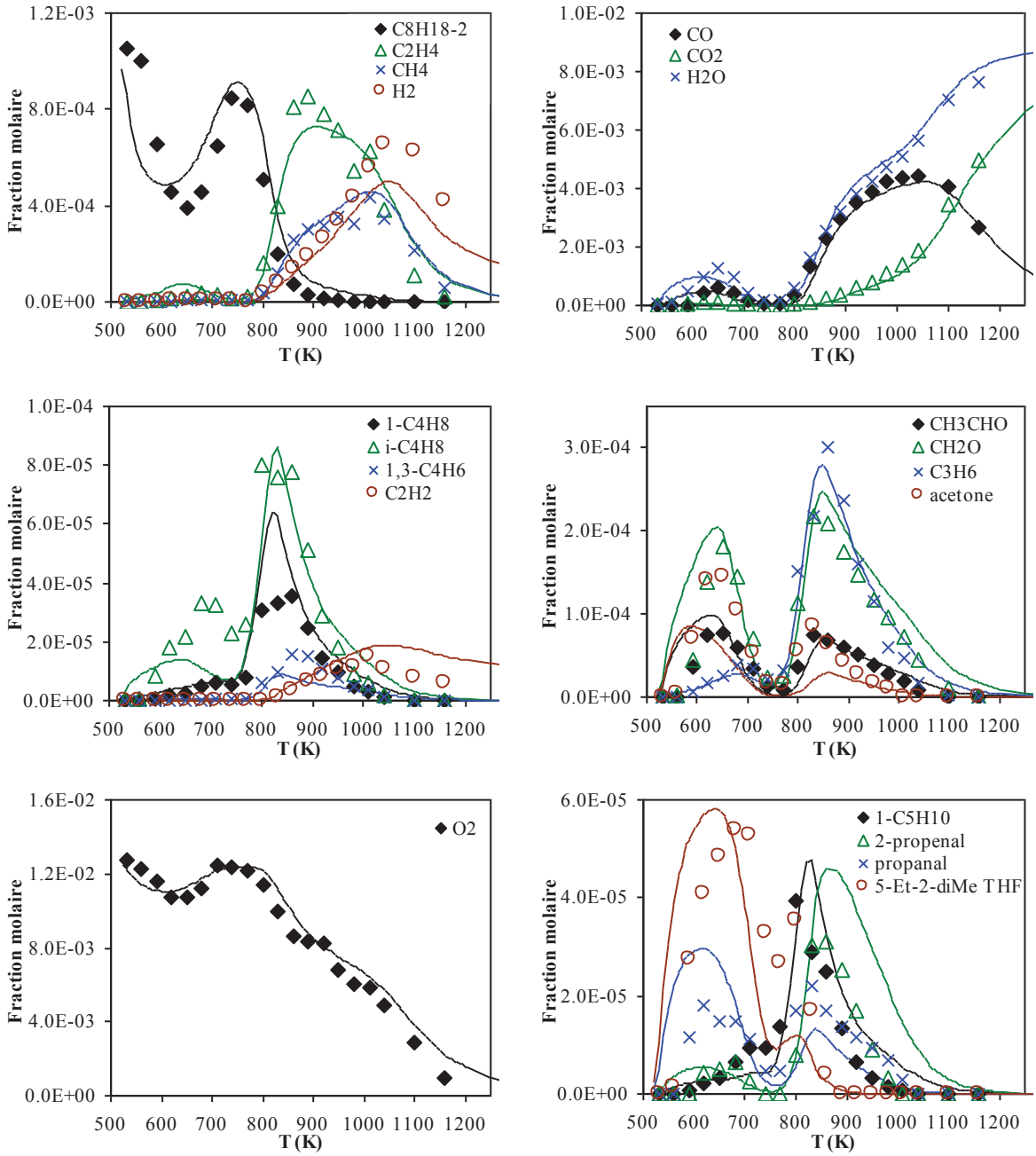


Figure V.18 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du 2-méthylheptane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%

5.2.6 Modélisation de l'oxydation de 3-méthylheptane

Comme précédemment, nous avons introduit le sous-mécanisme d'oxydation du 3-méthylheptane au mécanisme existant. Ce mécanisme a été développé par Sarathy et al. [4]. Les résultats expérimentaux modélisés ici sont ceux obtenus dans le cadre de cette étude, et décrits au Paragraphe 5.1.1. Ils ont été obtenus en réacteur parfaitement agité entre 530 et

1220 K, à haute pression (10 atm), à trois richesses et pour un temps de passage constant de 0,7 s. Pour la validation du modèle, seuls les résultats de l'oxydation du mélange stoechiométrique sont présentés. Ainsi nous avons comparé nos résultats expérimentaux pour l'oxydation du 3-méthylheptane avec les profils d'espèces simulés à l'aide du mécanisme proposé ici. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.19.

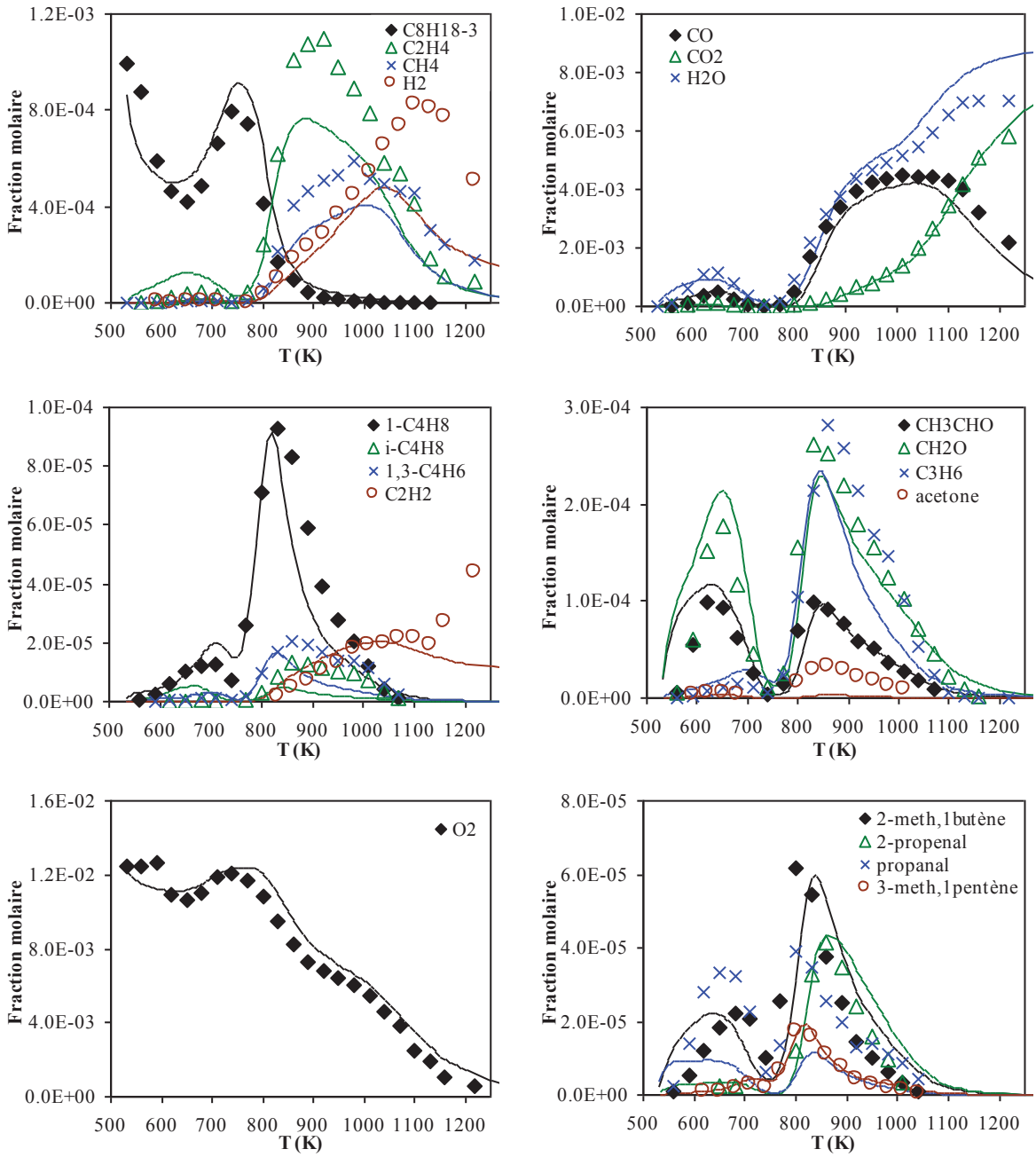


Figure V.19 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du 3-méthylheptane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%

De même que pour le 2-méthylheptane, le modèle reproduit très correctement l'oxydation du 3-méthylheptane sur l'ensemble de la gamme de températures et pour la majorité des espèces mesurées. Le modèle reproduit aussi très bien le profil de consommation du 3-méthylheptane, avec cependant la même tendance que pour son isomère, c'est-à-dire qu'il surestime légèrement la consommation de l'hydrocarbure initial dans la flamme froide et la sous-estime dans la zone de coefficient négatif de température. En revanche, le modèle sous-estime ici la production d'éthylène, de méthane et de propanal. De même que pour le 3-méthylheptane, on peut voir que le modèle reproduit correctement les fractions molaires de CO, de CO_2, d'eau, de formaldéhyde et d'oxygène sur tout le domaine de températures. Enfin, le modèle représente bien les concentrations des espèces caractéristiques de l'oxydation du 3-méthylheptane, comme le 2-méthylbut-1-ène, le 3-méthylpent-1-ène, ainsi que celle de l'éther cyclique majoritaire, le 2-éthyl-2,5-diméthyltetrahydrofurane.

5.2.7 Modélisation de l'oxydation de la décaline

La fraction des hydrocarbures di-naphténiques dans un kérosène de synthèse était jusqu'à présent représentée par le n-propylcyclohexane. Pour améliorer la représentation de cette famille chimique, nous avons décidé d'ajouter un sous-mécanisme d'oxydation de la décaline, ou décahydronaphtalène (Figure V.20). Celui-ci a été développé par Dagaut *et al.* [14] en collaboration avec le Politecnico di Milano. Pour valider l'insertion de ce sous-mécanisme, nous avons comparé les profils d'espèces simulés avec des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation de la décaline. Ces résultats expérimentaux ont été obtenus pour des températures comprises entre 950 et 1250 K, à pression atmosphérique, à différentes richesses et pour un temps de passage constant de 0,1 s. Les résultats exposés ici sont ceux obtenus pour le mélange stoechiométrique. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.21.

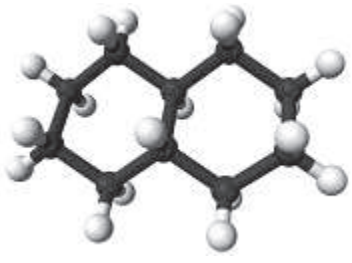


Figure V.20 : Représentation 3D de la décaline ($C_{10}H_{18}$)

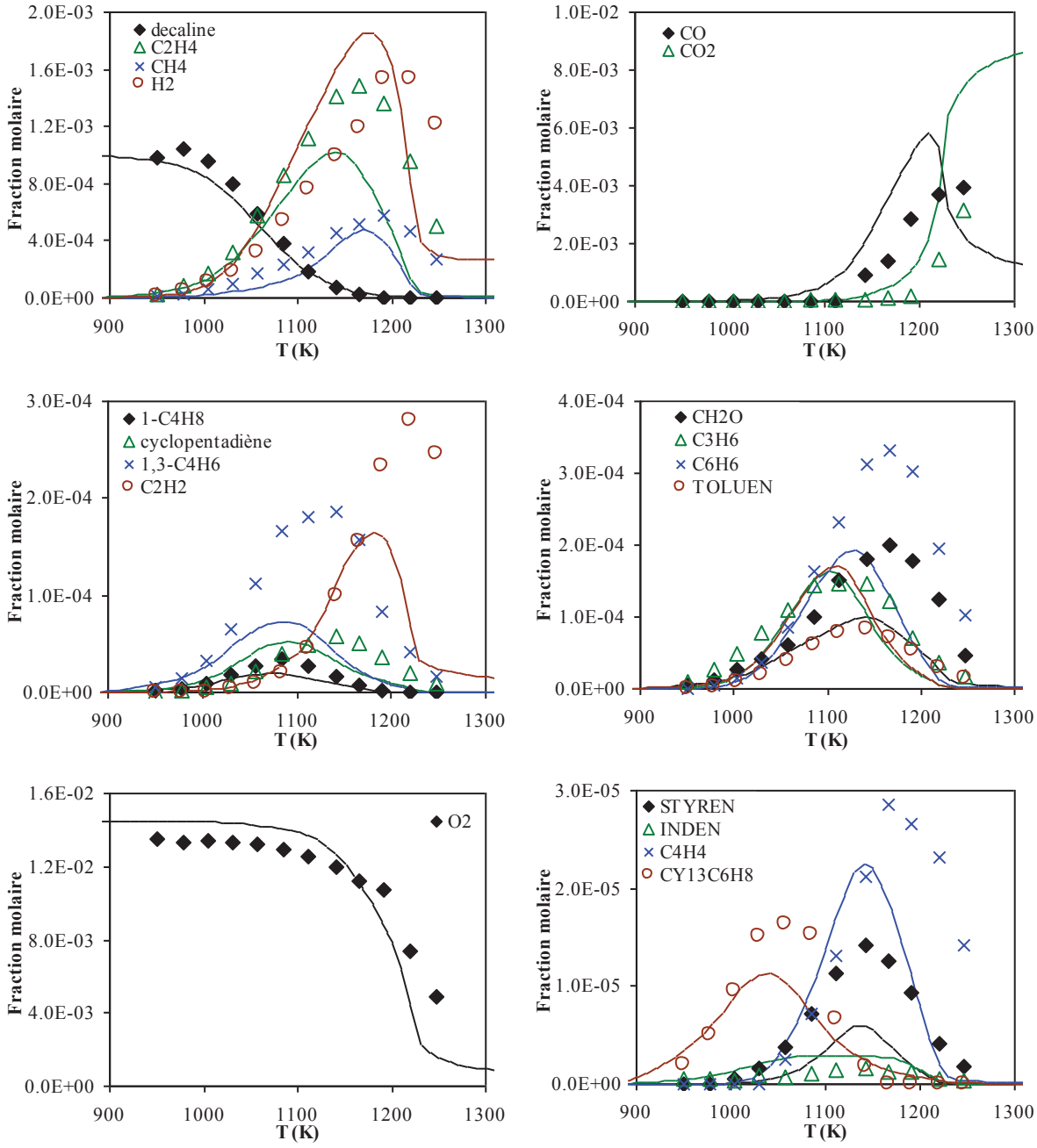


Figure V.21 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation de la décaline en réacteur auto-agité: P=1 atm ; τ =0,1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%

On peut constater sur la figure V.21 un accord raisonnable entre les données expérimentales et les profils simulés. Cependant, on constate quelques écarts entre les profils expérimentaux et théoriques sont notables. On remarque une sous-estimation de la production d'éthylène, de formaldéhyde, de buta-1,3-diène, d'acétylène et de benzène. Une surestimation de la production de l'hydrogène, du CO, du CO_2 et quelques espèces minoritaires comme l'acroléine (non présenté sur la figure) a été observée. On peut voir que le modèle prévoit

correctement la consommation de la décaline et de l'oxygène, ainsi que la formation de quelques intermédiaires, dont le propène et le 1,3-cyclopentadiène.

5.2.8 Modélisation de l'oxydation de la tétraline

Jusqu'à maintenant, les naphténo-aromatiques n'étaient pas représentés explicitement dans le modèle, mais assimilés à des aromatiques ou des naphtènes. Or, ces composés peuvent être présents dans un kérosène synthétique en quantité notable. Nous avons ainsi rajouté au modèle le sous-mécanisme d'oxydation de la tétraline (1,2,3,4-tétrahydonaphtalène) (Figure V.22). Ce sous-mécanisme, comme celui de la décaline, a été développé par Dagaut *et al.* [15] en collaboration avec le Politecnico di Milano. De la même façon que précédemment, nous avons comparé les profils simulés et des données expérimentales obtenues en réacteur auto-agité afin de valider l'insertion de ce sous-mécanisme. La confrontation expérience-modèle est présentée sur la figure V.23. Les résultats expérimentaux ont été obtenus dans un intervalle de températures compris entre 797 et 1102 K, à haute pression (10 atm), à différentes richesses et pour un temps de passage constant de 0,5 s. Les résultats présentés ici sont ceux obtenus pour le mélange stoechiométrique.

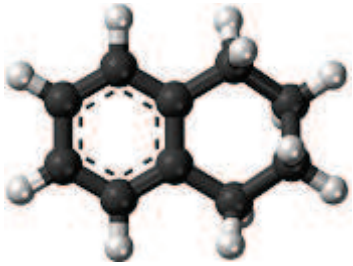


Figure V.22 : Représentation 3D de la tétraline ($C_{10}H_{12}$)

On peut voir sur la figure V.23 que le modèle simule de façon convenable l'oxydation de la tétraline. Le profil de consommation de la tétraline est bien représenté, alors que celui de l'oxygène est surestimé. Les profils de formation de CO, de CO_2, du méthane, de l'éthylène et de l'hydrogène sont correctement reproduits par le modèle. Cependant, la production de formaldéhyde, d'acroléine et de certains aromatiques, comme le toluène, est surestimée. On remarque enfin que le modèle sous-estime aussi la formation de quelques espèces comme le benzène et le styrène

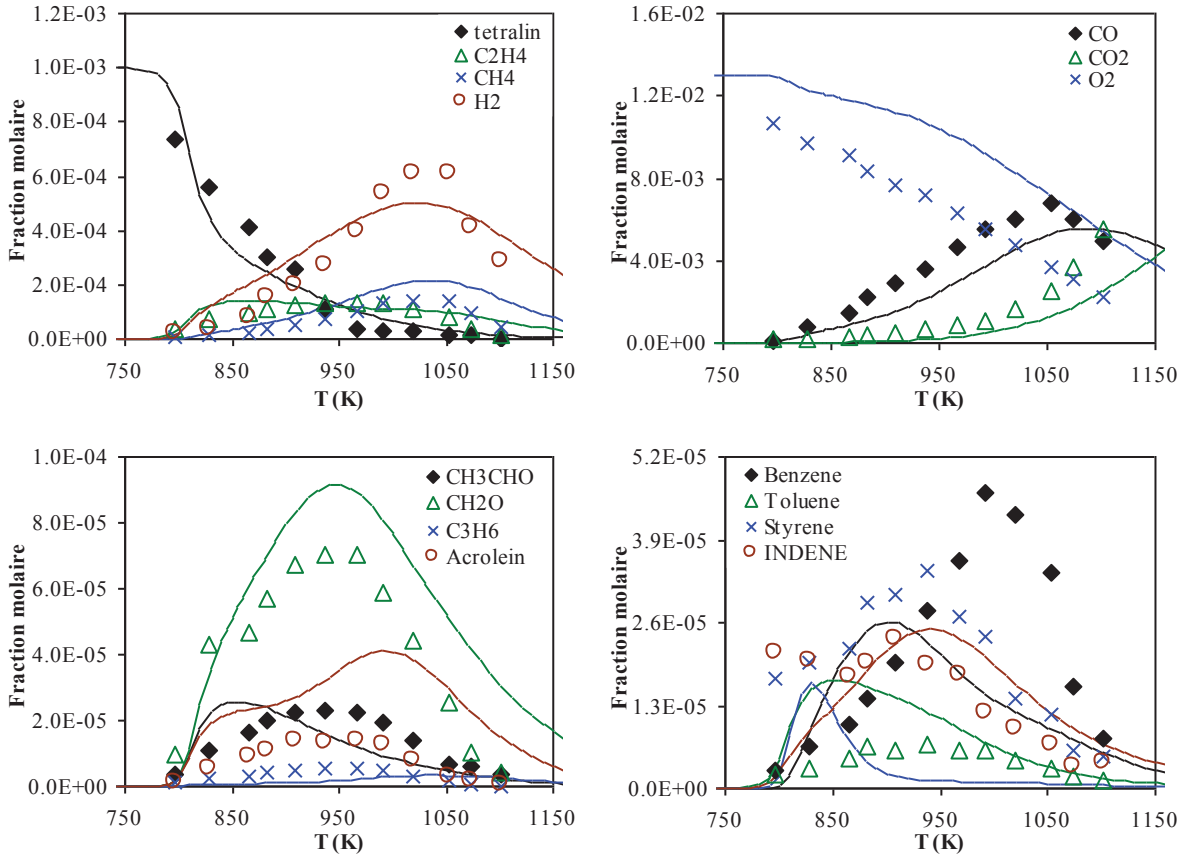


Figure V.23 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation de la tétraline en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,5 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%

5.3 Modélisation de délais d'auto-inflammation de composés purs et validation du modèle

Afin de valider le modèle global sur une large gamme de conditions expérimentales, nous avons décidé de modéliser les délais d'auto-inflammation de certains composés purs introduits dans notre modèle. Nous avons ensuite comparé ces résultats simulés aux données expérimentales correspondantes.

5.3.1 Simulation des délais d'auto-inflammation du n-décane

Des données expérimentales obtenues par Zhukov *et al.* [16] et Pfahl *et al.* [17] en tube à choc préchauffé sur des délais d'auto-inflammation de mélanges n-décane/air ont été modélisées. Ces délais ont été mesurés derrière une onde de choc réfléchie par détection du pic d'émission des radicaux OH* à 309 nm. Ces mesures ont été effectuées à 12 atm, à plusieurs richesses et pour des températures comprises entre 683 et 1322 K. Sur la figure V.24 sont uniquement présentés ceux obtenus pour le mélange stoechiométrique et à haute température.

Comme on peut le voir sur cette figure, le modèle simule correctement les délais d'auto-inflammation du n-décane à haute température. Cependant, les délais calculés à des températures en dessous de 1000 K étaient très surestimés, pouvant atteindre un facteur 10.

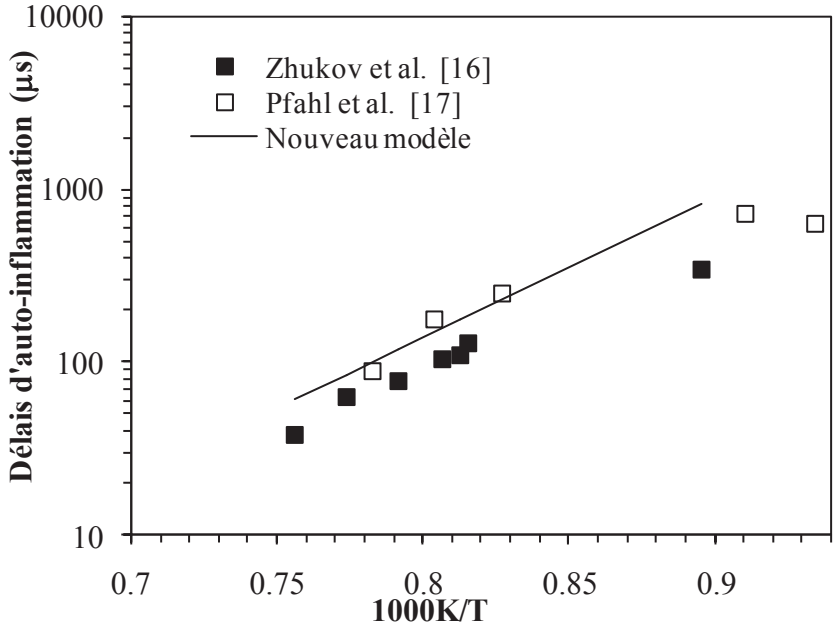


Figure V.24 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) de délais d'auto-inflammation du n-décane: P=12 atm ; Φ=1 ; X_{HC}=1,33% dans l'air [16] [17]

5.3.2 Simulation des délais d'auto-inflammation du n-propylcyclohexane

Nous avons de même effectué une revalidation du sous-mécanisme du n-propylcyclohexane en modélisant des données expérimentales de Dubois *et al.* [18]. Ces

données ont été obtenues en tube à choc chauffé par mesure des délais d'auto-inflammation derrière l'onde de choc réfléchie de mélange n-propylcyclohexane/O_2/Ar. Ces mesures sont basées sur la chimiluminescence des radicaux OH* et CH*, entre 10 et 20 bars, à des richesses de 0,2 à 1,5 et dans une gamme de températures comprises entre 1250 et 1800 K

La figure V.25 présente les résultats de la confrontation expérience-modèle pour le mélange stœchiométrique à 10 bars. Celle-ci montre un accord satisfaisant entre les données expérimentales et simulées sur l'ensemble du domaine de températures bien que l'on constate un léger retard des délais calculés.

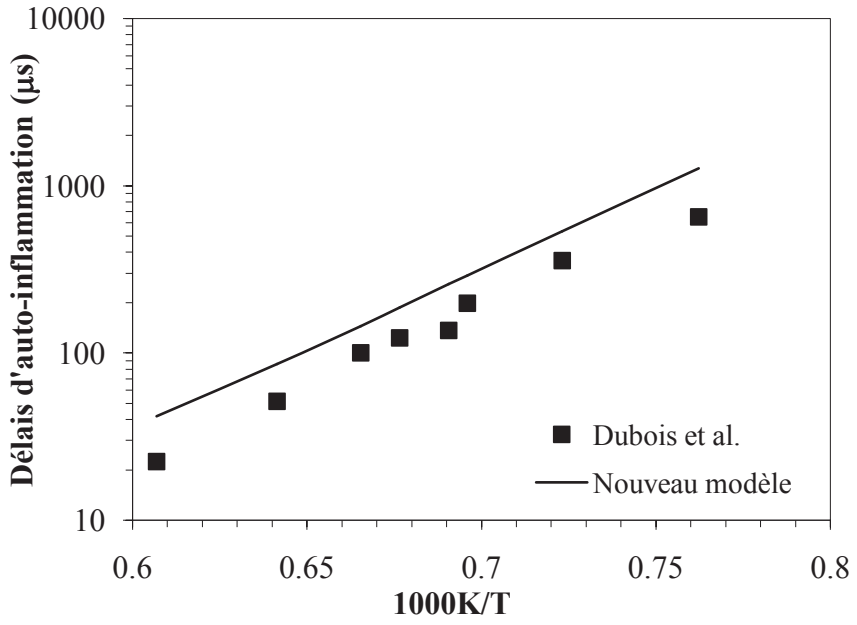


Figure V.25 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) de délais d'auto-inflammation du n-propylcyclohexane: P=10 bars ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,3% ; X_{Ar}=98,6% [18]

5.3.3 Simulation des délais d'auto-inflammation du 3-méthylheptane

Le sous-mécanisme du 3-méthylheptane a également été validé en modélisant des données expérimentales de la littérature. Ces données ont été obtenues par Wang *et al.* [19] en tube à choc à une pression de 20 atm, pour un mélange 3-méthylheptane/air stoechiométrique et des températures comprises entre 719 et 1230 K. La détermination des délais d'auto-inflammation a été effectuée par la mesure de pression (P_5) et par détection des radicaux OH* excités.

On peut voir sur la figure V.26 la confrontation entre les résultats expérimentaux de Wang *et al.* et ceux que nous avons obtenus avec le modèle pour le mélange stoechiométrique et à une pression de 20 atm. On constate que le modèle surestime les délais dans tout le domaine de températures. Cette surestimation est plus importante pour les températures comprises entre 850 et 1000K.

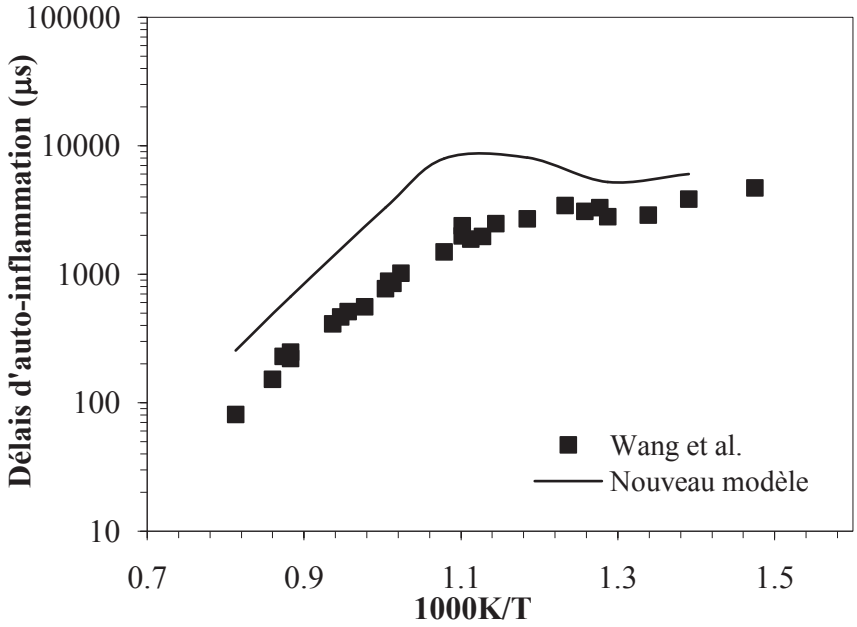


Figure V.26 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) de délais d'auto-inflammation du 3-méthylheptane: P=20 atm ; Φ=1 ; X_{HC}=1,65% dans l'air [19]

5.3.4 Simulation des délais d'auto-inflammation de la décaline

Enfin, nous avons modélisé expériences d'Oehlschlaeger *et al.* [20] portant sur des délais d'auto-inflammation de mélanges décaline/air pour valider le sous-mécanisme d'oxydation de la décaline. Ces mesures ont été effectuées en tube à choc à haute pression (9-15 et 35-48 atm), à des richesses de 0,5 et 1 et pour des températures comprises entre 990 et 1300 K. La détermination des délais d'auto-inflammation a été effectuée par détection du pic d'émission des radicaux OH*. Les résultats obtenus pour le mélange stœchiométrique à 12 atm sont présentés sur la figure V.27. On peut voir que le modèle surestime les délais d'auto-inflammation sur tout le domaine de températures.

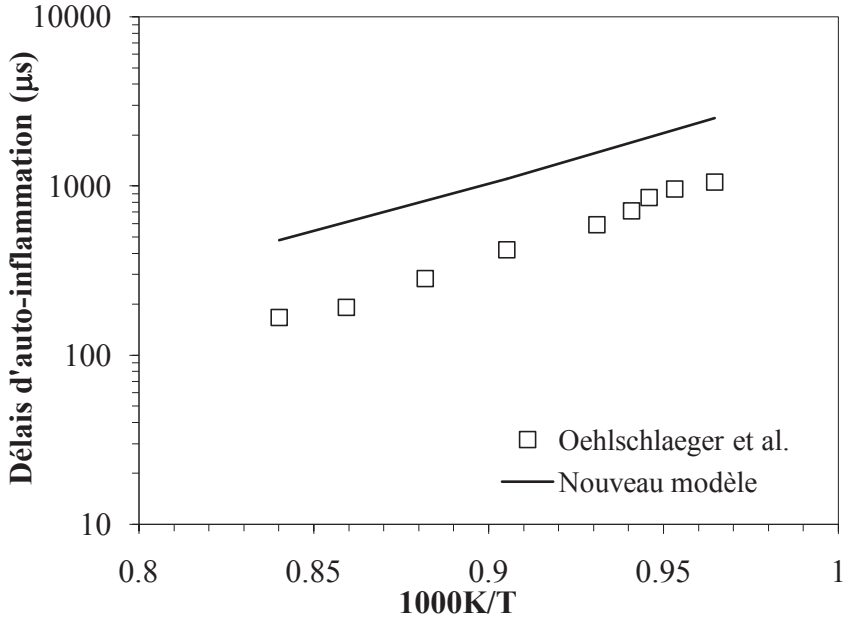


Figure V.27 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) de délais d'auto-inflammation de la décaline: P=12 atm ; Φ=1 ; X_{HC}=1,42% dans l'air [20]

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié expérimentalement l'oxydation de trois iso-paraffines en réacteur auto-agité afin de mieux représenter cette famille chimique dans nos modélisations de l'oxydation d'un kérosène de synthèse. Les trois hydrocarbures étudiés sont deux isomères de l'iso-octane (2,5-diméthylhexane et 3-méthylheptane), et le 2-méthylnonane comportant une chaîne carbonée plus longue. Les expériences ont été menées à haute pression (10 atm), dans une large gamme de températures, pour trois richesses de mélange et pour un temps de passage constant de 0,7 s. Ces expériences ont permis de comparer l'oxydation de ces iso-paraffines en confrontant les profils de concentration des réactifs, des produits et d'intermédiaires stables en fonction de la température. Il apparaît que la nature des espèces formées est essentiellement dépendante de la structure des molécules. La longueur de la chaîne carbonée influence également la nature des intermédiaires stables lourds, mais a principalement un rôle sur la réactivité de ces iso-paraffines et sur la concentration des produits formés.

La deuxième partie de ce Chapitre a été consacrée à la modélisation de l'oxydation de composés purs afin de valider les sous-mécanismes développés dans ce travail. On a pu voir que le modèle reproduit convenablement l'oxydation de la plupart de ces molécules, même si quelques améliorations restent encore à apporter pour certaines en réacteur auto-agité. Pour ce qui est de la modélisation des délais d'auto-inflammation, on a constaté de nombreux écarts (retards du modèle) lors des confrontations expérience-modélisation, excepté pour le n-propylcyclohexane. On notera que pour ce dernier les expériences ont été menées en dilution dans l'argon, alors que toutes les autres ont été menées dans l'air. On en déduit que le mécanisme proposé n'est pas bien adapté à la modélisation des délais d'auto-inflammation de mélanges hydrocarbure/air.

Références bibliographiques

[1] A. Mzé-Ahmed, K. Hadj-Ali, P. Diévart, P. Dagaut

Kinetics of oxidation of a synthetic jet fuel in a jet-stirred reactor: experimental and modeling study, Energy & Fuels, 2010, vol. 24, pp. 4904-4911

[2] A. Mzé-Ahmed, P. Dagaut, K. Hadj-Ali, G. Dayma, T. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, C. Naumann, U Riedel

Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study, Energy & Fuels, 2012, vol. 26, pp. 6070–6079

[1] P. Dagaut, F. Karsenty, G. Dayma, P. Diévart, K. Hadj-Ali, A. Mzé-Ahmed, M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, T. Kathrotia, T. Kick, C. Naumann, U Riedel, L. Thomas

Experimental and Detailed Kinetic Model for the Oxidation of a Gas to Liquid (GtL) Jet Fuel, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 835-847

[4] F. Karsenty, S. M. Sarathy, C. Togbé, C. K. Westbrook, G. Dayma, P. Dagaut, M. Mehl, W. J. Pitz,

Experimental and Kinetic Modeling Study of 3-Methylheptane in a Jet-Stirred Reactor, Energy & Fuels, 2012, vol.26, pp. 4680–4689 [4].

[5] S. M. Sarathy, T. Javed, F. Karsenty, A. Heufer, W. Wang, S. Park, A. Elwardany, A. Farooq, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, M. A. Oehlschlaeger, G. Dayma, H. J. Curran, P. Dagaut

A comprehensive combustion chemistry study of 2,5-dimethylhexane, 2014, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 1444–1459.

[6] P. Dagaut, M. Reuillon, and M.Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 3. n-Decane, Combustion Science and Technology, 1994, vol. 103, pp. 349-359

[7] P. Dagaut, M. Reuillon, M. Cathonnet, and D. Voisin

High pressure oxidation of normal decane and kerosene in dilute conditions from low to high temperature, Journal de chimie physique et de physico-chimie biologique, 1995, vol. 92, pp. 47-76

[8] P. Diévart

Oxydation en milieu ultra-pauvre de carburants types gazoles. Étude expérimentale en réacteur auto-agité et modélisation, Thèse, Université d'Orléans 2008

[9] A. Mzé Ahmed

Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants-modèles - Formation de polluants, Thèse, Université d'Orléans 2011

[10] P. Dagaut, M. Reuillon, and M.Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 1 n-Heptane and iso-Octane, Combustion Science and Technology, 1994, vol. 95, pp. 233–260

[11] K. Mati

Cinétique de combustion du gazole. Etude des aspects chimiques, Thèse, Université d'Orléans, 2005

[12] P. Dagaut, A. Ristori, A. El Bakali, and M. Cathonnet

The Oxidation of n-Propylbenzene: Experimental Results and Kinetic Modeling, Fuel, 2002, vol. 81, pp. 173–184

[13] S. M. Sarathy, C. K. Westbrook, M. Mehl, W. J. Pitz, C. Togbé, P. Dagaut, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger, U. Niemann, K. Seshadri, P. S. Veloo, C. Ji, F. N. Egolfopoulos, T. Lu,

Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C7 to C20, Combustion and Flame, 2011,vol. 158, pp. 2338-2357

[14] P. Dagaut, A. Ristori, A. Frassoldati, T. Faravelli, G. Dayma, E. Ranzi

Experimental and semi-detailed kinetic modeling study of decalin oxidation and pyrolysis over a wide range of conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 2012, vol. 34, pp. 289-296

[15] P. Dagaut, A. Ristori, A. Frassoldati, Ti. Faravelli, G. Dayma, and E. Ranzi

Experimental Study of Tetralin Oxidation and Kinetic Modeling of its Pyrolysis and Oxidation, Energy & Fuels, 2013, vol. 27, pp. 1576–1585

[16] V. P. Zhukov, V. A. Sechenov and A. Y. Starikovskii

Autoignition of n-decane at high pressure, Combustion and Flame, 2008, vol. 153, pp. 130-136

[17] U. Pfahl, K. Fieweger and G. Adomeit

Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures under Engine Conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 1996, vol. 26, pp. 781-789

[18] T. Dubois, N. Chaumeix, C. Paillard

Experimental and Modeling Study of n-Propylcyclohexane Oxidation under Engine-relevant Conditions, Energy & Fuels, 2009, vol. 23, pp. 2453-2466

[19] W. Wang, Z. Li, M. A. Oehlschlaeger, D. Healy, H. J. Curran, S. M. Sarathy, M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook

An experimental and modeling study of the autoignition of 3-methylheptane, Proceedings of the Combustion Institute, 2013, vol. 34, pp. 781-789

[20] M. Oehlschlaeger, H. S. Shen, A. Frassoldati, S. Pierucci, E. Ranzi

Experimental and Kinetic Modeling Study of the Pyrolysis and Oxidation of Decalin, Energy & Fuels, 2009, vol. 23, pp. 1464-1472

Chapitre VI

Etude expérimentale de l'oxydation de kérosènes de synthèse et de mélanges d'hydrocarbures modèles

6 Etude expérimentale de l'oxydation de kérosènes de synthèse et de mélanges d'hydrocarbures modèles 181

6.1 Etude expérimentale de l'oxydation de kérosènes de synthèse 181

6.1.1 Oxydation d'un kérosène de synthèse SPK pur 181

6.1.1.1 Conditions expérimentales 182

6.1.1.2 Résultats expérimentaux 183

6.1.2 Oxydation d'un kérosène de synthèse GtL pur 187

6.1.2.1 Conditions expérimentales 187

6.1.2.2 Résultats expérimentaux 188

6.1.3 Oxydation d'un kérosène de synthèse CtL pur 190

6.1.3.1 Conditions expérimentales 191

6.1.3.2 Résultats expérimentaux 191

6.2 Etude expérimentale de l'oxydation de mélange d'hydrocarbures modèles 193

6.2.1 Oxydation de mélanges modèles du SPK 193

6.2.1.1 Conditions expérimentales 194

6.2.1.2 Résultats expérimentaux 195

6.2.1.3 Comparaison expérimentale kérosène-mélanges 195

6.2.2 Oxydation de mélanges modèles du GtL 201

6.2.2.1 Conditions expérimentales 202

6.2.2.2 Résultats expérimentaux 203

6.2.2.3 Comparaison expérimentale kérosène-mélange 203

6.2.3 Oxydation de mélanges modèles du CtL 206

6.2.3.1 Conditions expérimentales 208

6.2.3.2 Résultats expérimentaux 209

6.2.3.3 Comparaison expérimentale kérosène-mélange 210

6.3 Conclusion 214

Références bibliographiques 216

6 Etude expérimentale de l'oxydation de kérosènes de synthèse et de mélanges d'hydrocarbures modèles

Ce chapitre présente les résultats des différentes études expérimentales menées en réacteur auto-agité sur l'oxydation de carburéacteurs alternatifs. Nous avons choisi d'étudier l'oxydation de trois kérosènes synthétiques produits par la synthèse Fischer-Tropsch (F-T) : un kérosène synthétique paraffinique (SPK) fourni par l'IFP ; un Coal-to-Liquid de Sasol ; un Gas-to-Liquid de Shell. Nous avons ensuite procédé à l'étude expérimentale de l'oxydation de mélanges modèles constitués d'hydrocarbures représentatifs de chacune des familles chimiques présentes dans ces carburants. Des mécanismes cinétiques adaptés à ces carburants de synthèse seront ensuite développés puis validés par confrontation avec les résultats expérimentaux (Chapitre VII).

6.1 Etude expérimentale de l'oxydation de kérosènes de synthèse

L'origine du gaz de synthèse utilisé par la synthèse F-T pouvant être de nature diverses (gaz, charbon ou biomasse), la composition des carburants liquides issus de ce processus en sera variable d'un carburant à l'autre. De plus, ce procédé de synthèse pouvant fournir des carburants liquides destinés aussi bien aux moteurs d'avions qu'aux moteurs essence ou diesel, leur composition et ainsi leurs caractéristiques physico-chimiques sera fortement dépendante des paramètres liés à ce procédé. La première étape de ces travaux a ainsi porté sur l'étude de l'oxydation de trois kérosènes de synthèse d'origines et de compositions distinctes.

6.1.1 Oxydation d'un kérosène de synthèse SPK pur

Le premier kérosène considéré dans cette étude est un kérosène synthétique paraffinique (SPK) fourni par l'IFP dont la composition est décrite dans le tableau VI.1. Comme on peut le voir dans ce tableau, ce carburant de synthèse est essentiellement composé

d'une large fraction d'iso-paraffines, mais aussi de n-paraffines et d'une très faible portion d'aromatiques. L'étude de ce carburéacteur est intéressante pour sa simplicité de composition, en particulier sa large fraction d'iso-paraffines, ce qui a permis d'étudier cette famille chimique très présentes dans les carburants synthétiques.

Tableau VI.1 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du SPK (IFP)

Carburant	Composition (%massique)	Caractéristiques
SPK (IFP)	iso-paraffines : 79,88 % n-paraffines : 19,63 % aromatiques : 0,49 %	$C_{11,5}H_{24,41}$ M = 162,41 $g.mol^{-1}$ ρ = 0 ,757 $g.cm^{-3}$ H/C : 2,12 CN : 45,45

6.1.1.1 *Conditions expérimentales*

L'oxydation du kérosène synthétique paraffinique de l'IFP a été étudiée expérimentalement en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) dans un large domaine de températures ($560 \leq T\ (K) \leq 1110$), à haute pression (10 atm) et à des richesses comprises entre 0,5 et 2. Dans nos expériences le temps de passage a été maintenu constant (τ=0,7 s). Le détail des conditions expérimentales est reporté dans le tableau VI.2.

Tableau VI.2 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du SPK en JSR

Richesse	X_{HC} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Pression (atm)	Temps de passage (s)	Température (K)
0,5	$1,0.10^{-3}$	$35,21.10^{-3}$	$9,6379.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1030
1	$1,0.10^{-3}$	$17,6.10^{-3}$	$9,8140.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110
2	$1,0.10^{-3}$	$8,80.10^{-3}$	$9,9020.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1110

6.1.1.2 *Résultats expérimentaux*

Les profils des fractions molaires des réactifs, produits et intermédiaires stables en fonction de la température obtenus lors de l'oxydation du SPK sont présentés sur les figures VI.1, VI.2 et VI.3. Plusieurs techniques d'analyses ont été utilisées pour l'analyse qualitative et quantitative des gaz de combustion, notamment la spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier et la chromatographie en phase gazeuse couplée à différents détecteurs (catharomètre, ionisation de flamme, spectrométrie de masse). Les expériences ont été menées pour un mélange pauvre, un mélange riche et à la stœchiométrie.

Nous avons pu observer, dans l'ensemble des conditions expérimentales, les trois régimes d'oxydation : la flamme froide, le coefficient négatif de température et le domaine de haute température. De nombreuses espèces, de tailles et de familles chimiques différentes, ont pu être identifiées et quantifiées lors de l'oxydation du SPK. Parmi ces produits, on remarque que le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone et l'eau sont les espèces majoritaires. L'éthylène, le formaldéhyde, le méthane, le propène, l'acétaldéhyde et l'hydrogène sont de même produits dans des quantités importantes. On constate ainsi que les composés majoritaires formés lors de l'oxydation de mélanges complexes de type kérosène sont identiques à ceux formés lors de l'oxydation de composés purs (Chapitre V). On remarque aussi la formation d'un certain nombre de produits oxygénés (des aldéhydes et des cétones) comme le propanal, le butanal, le butèn-2-al, l'acétone et la butan-2-one. De nombreux alcènes ont également été détectés comme le but-1-ène, l'isobutène, le cis et le trans but-2-ène, le buta-1,3-diène, le penta-1,3-diène, le 2-méthylbut-1-ène, le hex-1-ène et le hept-1-ène. Enfin, certains composés aromatiques ont été identifiés comme le benzène et le toluène. Nous avons pu quantifier uniquement des produits relativement légers, mais aucun réactif ni produit lourd en raison du nombre d'espèces présentes dans ce kérosène. En effet, la complexité de ce type de carburant rend la séparation des différents composés lourds en chromatographie quasiment impossible. Cependant, certains composés plus lourds ont pu être identifiés comme des iso-alcanes, des alcanes ou des alcènes mais ne sont pas présentés ici.

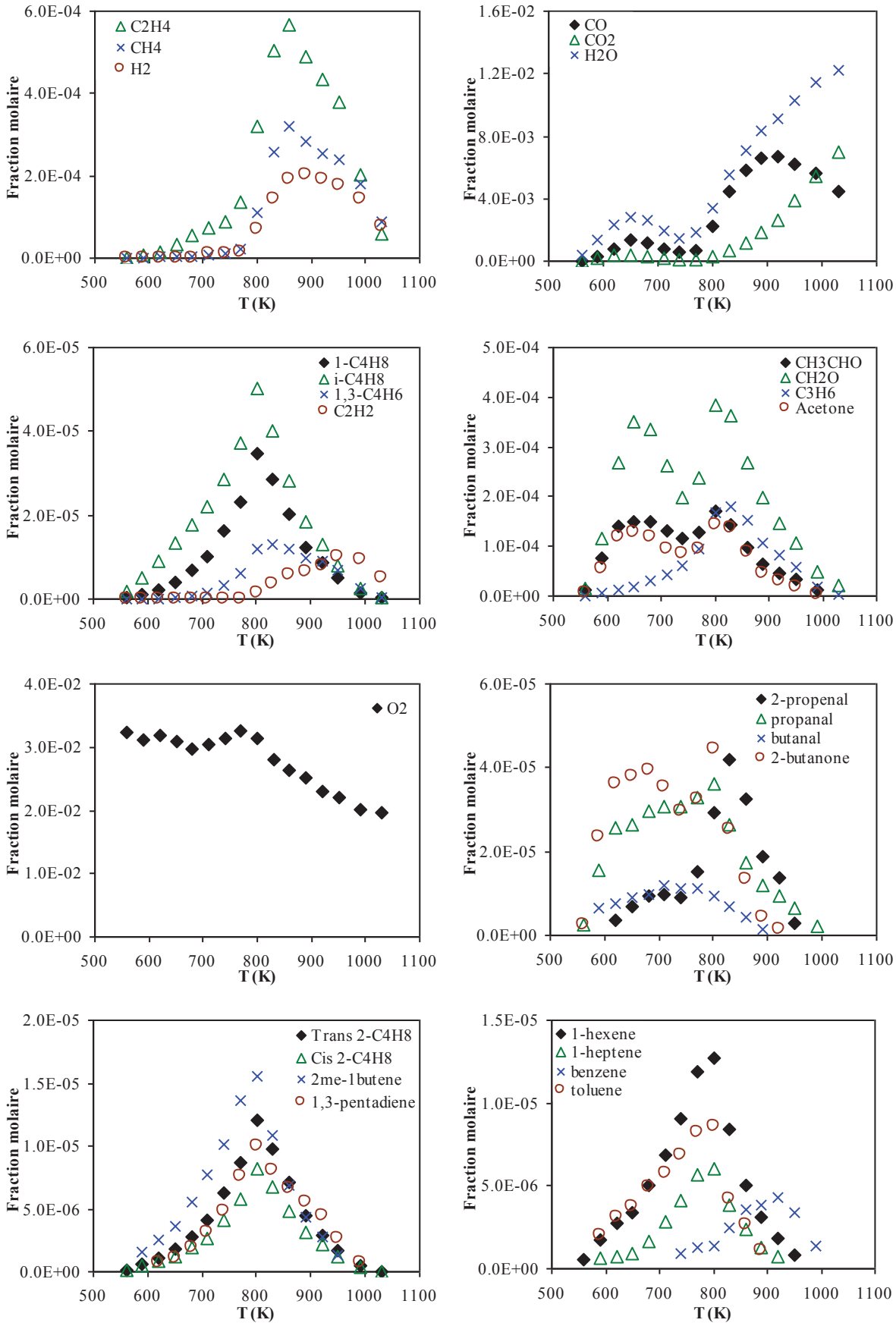


Figure VI.1 : Oxydation du SPK en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=0,5 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

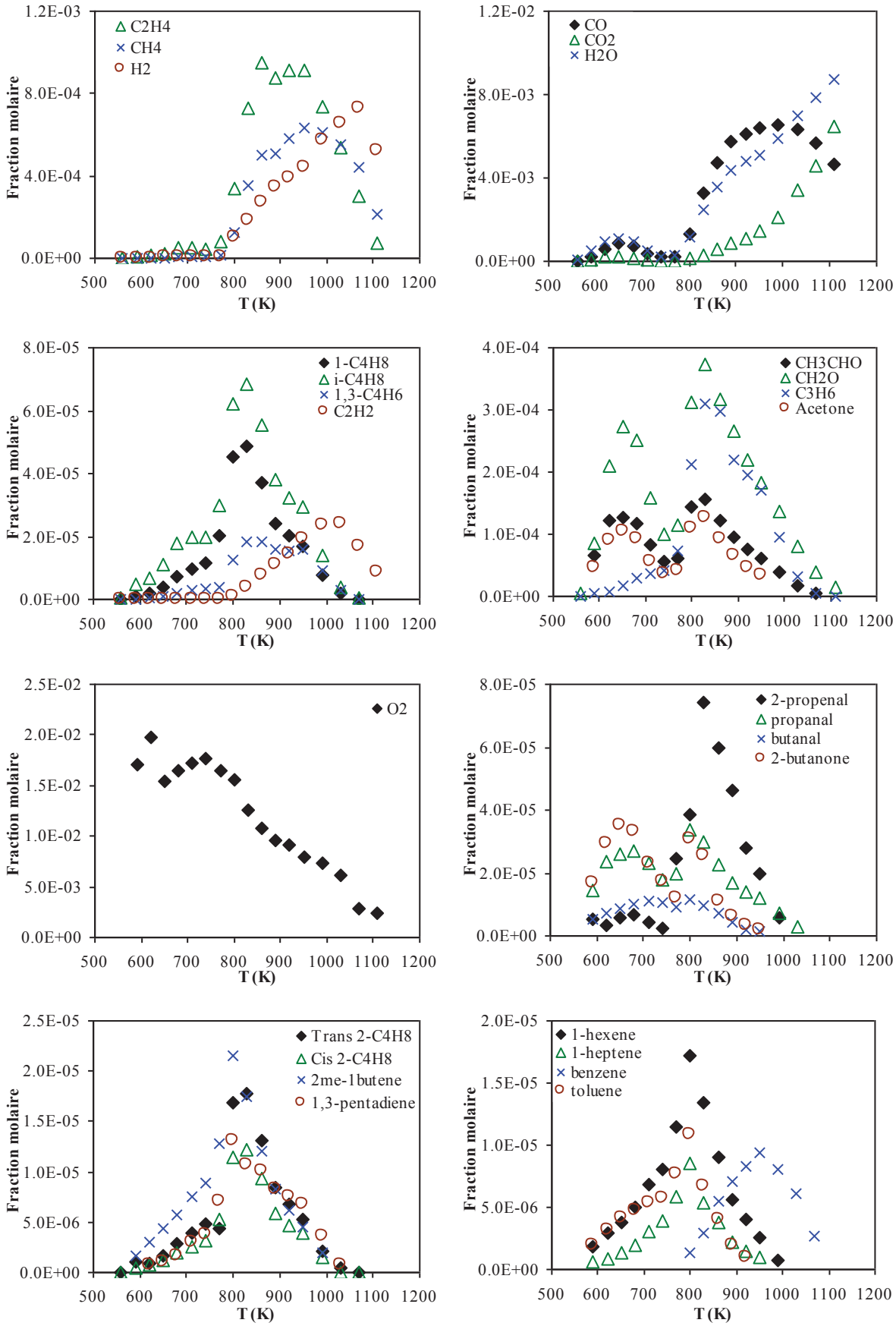


Figure VI.2 : Oxydation du SPK en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

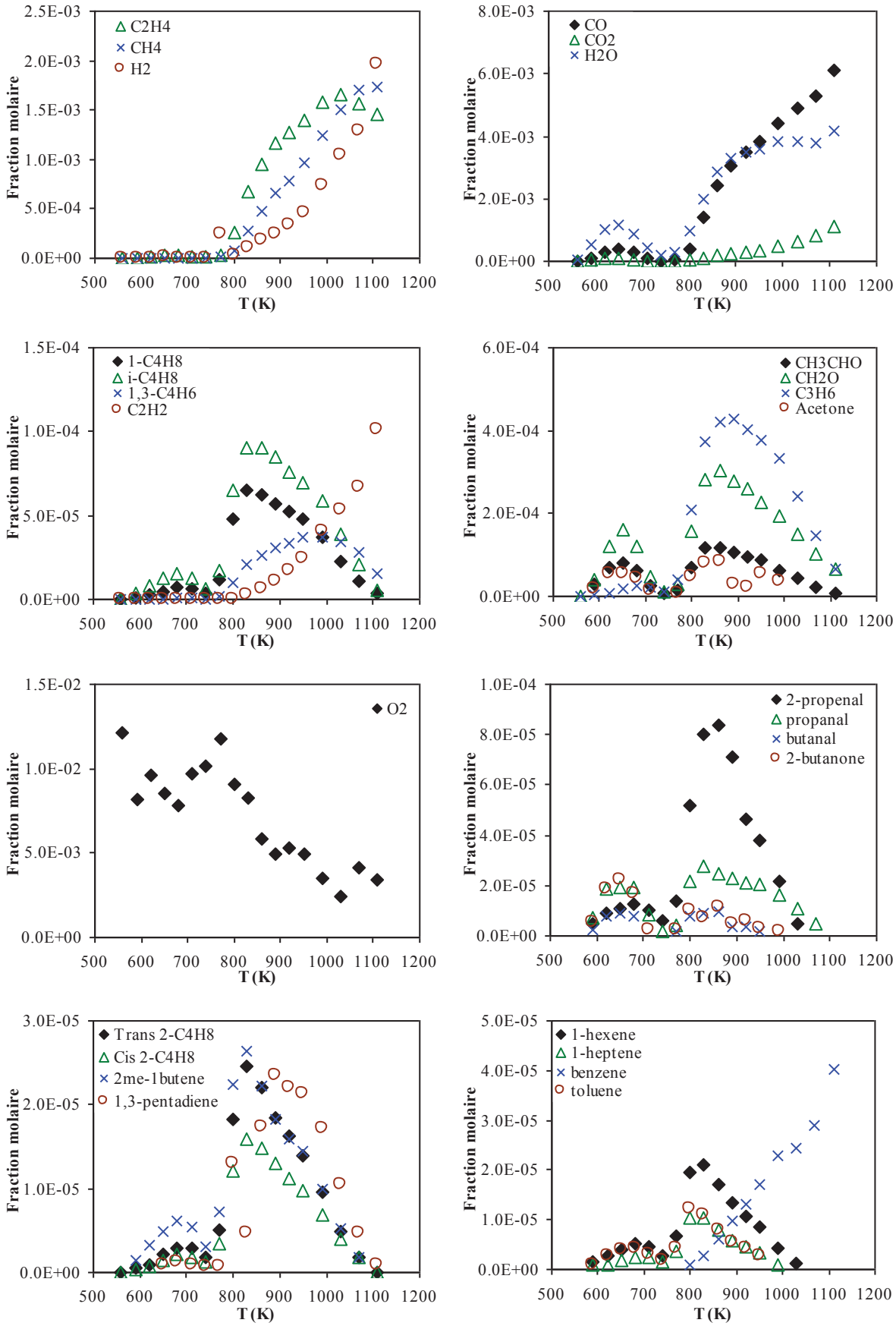


Figure VI.3 : Oxydation du SPK en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

On peut voir certaines tendances sur les profils d'espèces entre les trois richesses de mélange, notamment sur l'évolution de la quantité maximale des produits et intermédiaires formés. En effet, on remarque par exemple que la quantité de formaldéhyde diminue avec l'augmentation de la richesse. C'est également le cas pour le propanal et le butanal. En revanche, on constate que l'évolution des alcènes montre une tendance inverse, notamment à haute température. On peut également voir cette augmentation de la fraction molaire avec la richesse pour les aromatiques comme le toluène, mais spécialement pour le benzène qui voit sa fraction molaire multipliée par un facteur 10 entre φ=0,5 et φ=2. On observe enfin une augmentation du coefficient négatif de température lorsque la concentration initiale d'oxygène diminue sur la majeure partie des produits et intermédiaires stables. Ainsi, on observe un CNT plus prononcé en milieu riche (φ=2).

6.1.2 Oxydation d'un kérosène de synthèse GtL pur

Le deuxième carburant étudié ici est un kérosène synthétique de type Gas-to-Liquid (GtL) formé à partir du gaz naturel par le procédé de synthèse F-T. Ce kérosène a été fourni par Shell et sa composition est détaillée dans le tableau VI .3.

Tableau VI.3 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du GtL (Shell)

Carburant	Composition (%massique)	Espèces principales	Caractéristiques
GtL (Shell)	n-paraffines : 28,1 %	$C_9 - C_{11}$	$C_{10,45}H_{23,06}$
	iso-paraffines : 62,8 %	$C_{10} - C_{12}$	M = 148,46 g.mol^{-1}
	di-naphtènes : 8,2 %	C_{10}-C_{11}	ρ = 0 ,737 g.cm^{-3}
	mononaphtènes : 0,6 %	$C_9 - C_{11}$	H/C : 2,20
	aromatiques : 0,2 %	$C_9 - C_{10}$	CN : 57,94

6.1.2.1 *Conditions expérimentales*

L'oxydation du kérosène de synthèse de type GtL a été étudiée expérimentalement en réacteur auto-agité à des températures comprises entre 560 et 1110 K, à haute pression (10

atm) et pour un mélange stœchiométrique uniquement. Dans nos expériences le temps de passage a été maintenu constant à τ=0,7 s. Le détail des conditions expérimentales est présenté dans le tableau VI.4.

Tableau VI.4 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du GtL en JSR

Richesse	**X_{HC} initiale**	**X_{O2} initiale**	**X_{N2} initiale**	**Pression (atm)**	**Temps de passage (s)**	**Température (K)**
1	$1{,}0.10^{-3}$	$16{,}215.10^{-3}$	$9{,}82785.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110

6.1.2.2 *Résultats expérimentaux*

Les résultats expérimentaux sont présentés sur la figure VI.4. Ce sont des profils de fractions molaires des réactifs, produits et intermédiaires stables en fonction de la température obtenus lors de l'oxydation du GtL. Les expériences ont été menées uniquement pour un mélange stœchiométrique dans le but d'avoir des résultats dans les mêmes conditions que les expériences précédentes.

Grâce aux différents appareils d'analyse, nous avons pu identifier et quantifier de nombreuses espèces, de tailles et de familles chimiques différentes. Nous avons aussi pu voir que l'oxydation de ce kérosène présente dans cette condition expérimentale les trois régimes d'oxydation : la flamme froide, le coefficient négatif de température et le domaine de haute température.

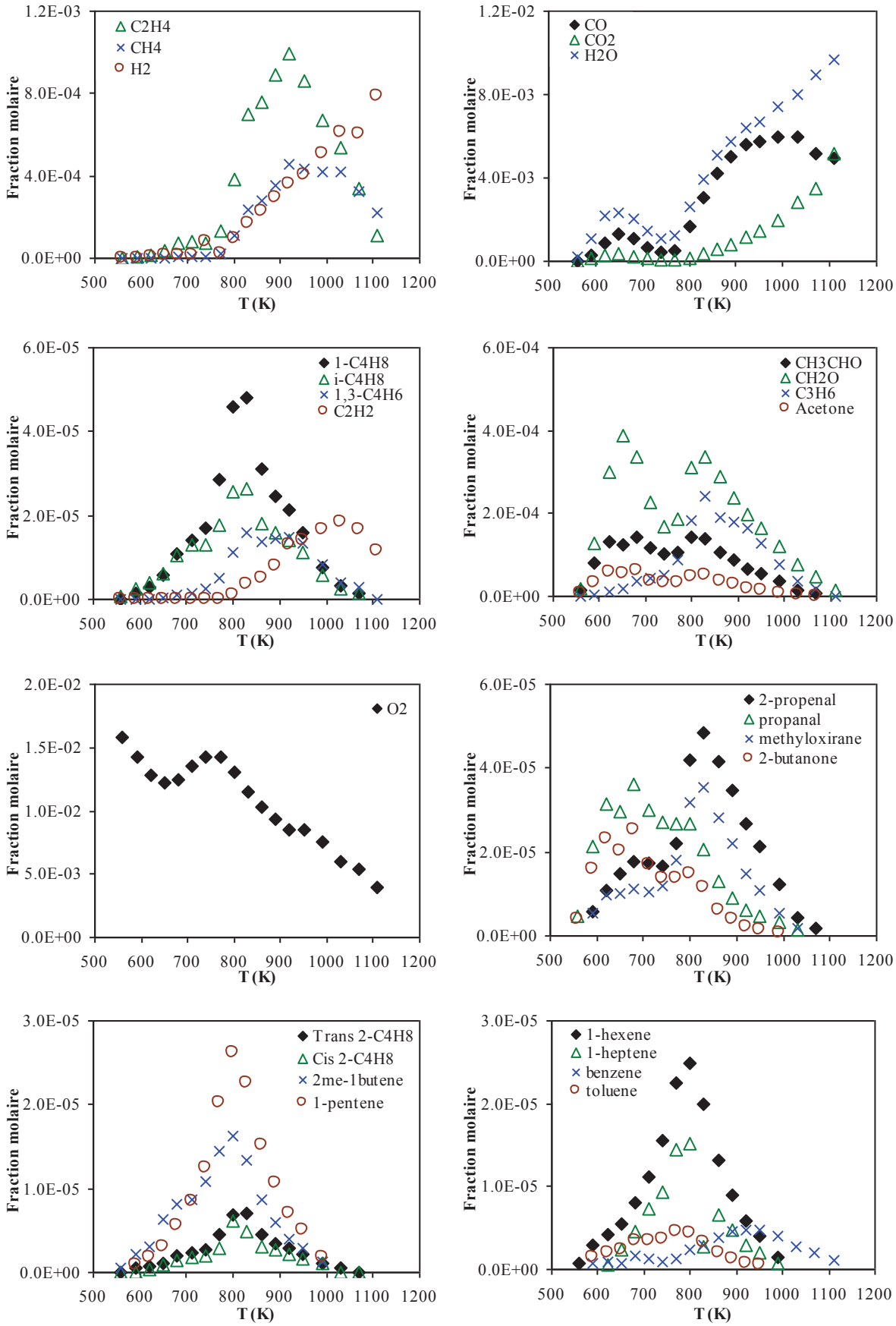


Figure VI.4 : Oxydation du GtL en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

Les espèces majoritaires détectées sont les mêmes que celles observées pour l'oxydation du SPK, à savoir du monoxyde de carbone, du dioxyde de carbone et de l'eau, mais aussi de l'éthylène, du formaldéhyde, du méthane, du propène, de l'acétaldéhyde et de l'hydrogène. Les profils de concentration d'un certain nombre d'autres espèces sont présentés et sont pour la plupart les mêmes que pour le SPK, à l'exception de quelques unes comme le méthyloxirane (C_3H_6O). Mais la différence principale entre les deux kérosènes apparait au niveau de la quantité formée de chaque espèce. En effet, on peut voir certaines variations entre les profils, directement liées à la composition de ces kérosènes, notamment sur les espèces spécifiques à une famille chimique comme l'isobutène ou le 2-méthylbut-1-ène pour les iso-paraffines. On peut aussi voir la différence de réactivité entre ces deux kérosènes (vérifiable par leur indice de cétane) sur les profils de concentration des produits principaux comme le CO, le CO_2, l'eau ou le formaldéhyde, notamment dans le domaine des basses températures. De même que pour le SPK, nous n'avons pu quantifier que des produits relativement légers, dû à la complexité de ce type de carburant qui rend quasiment impossible la séparation des différents composés lourds en chromatographie.

6.1.3 Oxydation d'un kérosène de synthèse CtL pur

Le troisième et dernier carburant étudié est un kérosène synthétique formé à partir de la synthèse Fischer-Tropsch. Ce kérosène de synthèse, appelé CtL (Coal to Liquid), est formé à partir du charbon et a été fourni par le groupe pétrochimique Sasol. Sa composition chimique et ses caractéristiques physico-chimiques sont décrites dans le tableau IV.5.

Tableau VI.5 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du CtL (Sasol)

Carburant	Composition (%massique)	Espèces principales	Caractéristiques
CtL (Sasol)	n-paraffines : 5,7 % iso-paraffines : 36,3 % di-naphtènes : 28,3 % mononaphtènes : 16,1 % monoaromatiques : 4 % naphténo-aromatiques : 9,6 %	$C_9 - C_{11}$ $C_{10} - C_{12}$ $C_{10} - C_{15}$ $C_9 - C_{13}$ $C_{10} - C_{13}$ /	$C_{11,06}H_{21,6}$ M = 154,32 g.mol^{-1} ρ = 0 ,815 g.cm^{-3} H/C : 1,95 CN : 32,7

Ce kérosène de synthèse est le plus complexe en termes de composition en comparaison des deux autres. Il a ainsi permis l'étude d'autres familles d'espèces chimiques peu étudiées jusqu'à présent.

6.1.3.1 *Conditions expérimentales*

L'étude expérimentale de l'oxydation du kérosène de synthèse de type CtL a été menée en réacteur auto-agité dans un large domaine de températures ($560 \leq T\ (K) \leq 1110$), à haute pression (10 atm) et pour un mélange stœchiométrique uniquement. Dans nos expériences le temps de passage a été maintenu constant à τ=0,7 s. Le détail des conditions expérimentales est reporté dans le tableau VI.6.

Tableau VI.6 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du CtL en JSR

Richesse	**X_{HC} initiale**	**X_{O2} initiale**	**X_{N2} initiale**	**Pression (atm)**	**Temps de passage (s)**	**Température (K)**
1	$1{,}0.10^{-3}$	$16{,}46.10^{-3}$	$9{,}8254.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110

6.1.3.2 *Résultats expérimentaux*

La figure VI.5 présente les profils des fractions molaires des réactifs, produits et intermédiaires stables en fonction de la température obtenus lors de l'oxydation du CtL. Les expériences ont été menées uniquement pour un mélange stœchiométrique dans le but d'avoir des résultats dans les mêmes conditions que les expériences précédentes. Nous avons pu identifier et quantifier de nombreuses espèces, de tailles et de familles chimiques différentes à l'aide des différents appareils d'analyse. Les trois régimes d'oxydation sont observables lors de l'oxydation de ce kérosène : la flamme froide, le coefficient négatif de température et le domaine de haute température.

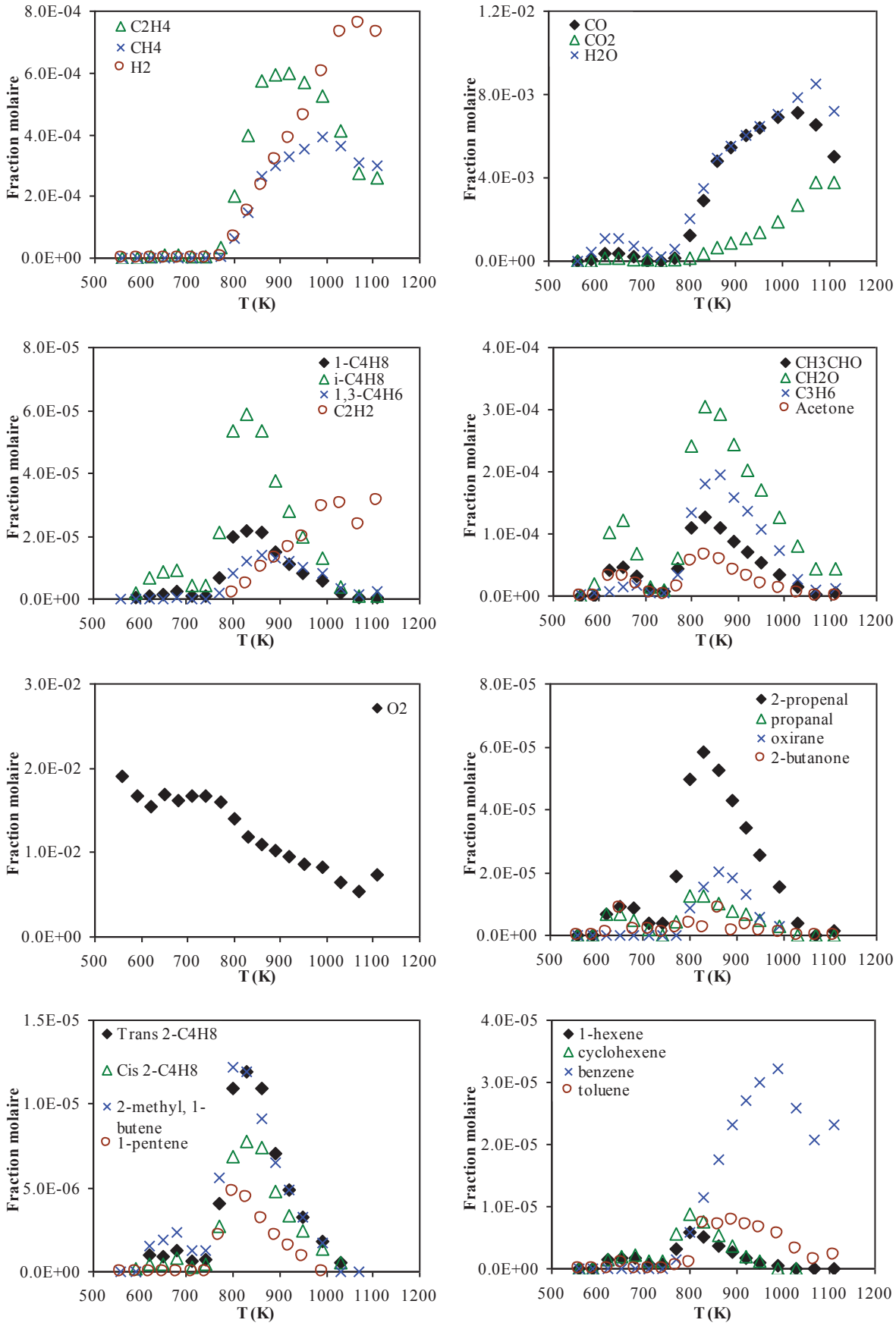


Figure VI.5 : Oxydation du CtL en réacteur auto-agité :
P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1%

Les espèces majoritaires mesurées sont du monoxyde de carbone, du dioxyde de carbone et de l'eau, ainsi que de l'éthylène, du formaldéhyde, du méthane, du propène, de l'acétaldéhyde et de l'hydrogène. Ces composés sont les mêmes que ceux identifiés lors de l'oxydation des deux autres kérosènes de synthèse. On remarque aussi d'autres espèces similaires entre les trois kérosènes comme du propanal, du propèn-2-al, du 2-méthyl-1-butène, etc. Cependant, certaines différences sont notables. Celles-ci apparaissent notamment sur la quantité formée des différents composés. Cela vient de la variation de la composition et de la réactivité de ces carburéacteurs. En effet, ce CtL a un indice de cétane bien plus faible que celui du SPK, qui est lui-même inférieur à celui du GtL. On constate cette variation de réactivité sur les profils de beaucoup d'espèces, en particulier sur l'eau, le CO, le CO_2 et le formaldéhyde.

6.2 Etude expérimentale de l'oxydation de mélange d'hydrocarbures modèles

Afin d'étudier et de mieux comprendre l'oxydation des kérosènes de synthèse, nous avons procédé à l'étude expérimentale de l'oxydation de mélanges modèles constitués de hydrocarbures représentatifs de chacune des familles chimiques présentes dans ces trois carburants. Aussi, ces études permettront de valider le modèle cinétique sur des résultats d'expériences impliquant des mélanges de compositions parfaitement connues et représentatives de celles des carburéacteurs étudiés ici.

6.2.1 Oxydation de mélanges modèles du SPK

Cette section présente les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation de deux mélanges d'hydrocarbures modèles représentant le SPK. Lors du développement de ces mélanges, nous voulions remplacer l'iso-octane par une iso-paraffine correspondant mieux à la composition du SPK fourni par l'Institut Français du Pétrole, c'est-à-dire une molécule comportant une chaîne carbonée plus longue et étant moins ramifiée que l'iso-octane. Nous avons choisi pour cela le 2-méthylnonane. Un premier mélange a donc été préparé (Tableau VI.7). Puis, pour vérifier l'importance du respect des proportions de chacune

des familles chimiques sur la réactivité et la formation des produits et intermédiaires d'oxydation, nous avons préparé un nouveau mélange avec des proportions de n-décane et de 2-méthylnonane inversées (Tableau VI.8).

Tableau VI.7 Composition et caractéristiques physico-chimiques du mélange modèle #1 pour représenter l'oxydation du SPK

	formule chimique	**fraction massique (%)**	**fraction molaire (%)**	**concentration (ppm)**
2-méthylnonane	$C_{10}H_{22}$	80	80	920
n-décane	$C_{10}H_{22}$	19,5	19,5	224
n-butylbenzène	$C_{10}H_{14}$	0,5	0,5	6
Caractéristiques physico-chimiques	$C_{10}H_{21,96}$; H/C : 2,20 ; CN : 59			

Tableau VI.8 Composition et caractéristiques physico-chimiques du mélange modèle #2 pour représenter l'oxydation du SPK

	formule chimique	**fraction massique (%)**	**fraction molaire (%)**	**concentration (ppm)**
n-décane	$C_{10}H_{22}$	80	80	920
2-méthylnonane	$C_{10}H_{22}$	19,5	19,5	224
n-butylbenzène	$C_{10}H_{14}$	0,5	0,5	6
Caractéristiques physico-chimiques	$C_{10}H_{21,96}$; H/C : 2,20 ; CN : 72			

6.2.1.1 *Conditions expérimentales*

Les résultats expérimentaux ont été obtenus, pour les deux mélanges, à l'aide du réacteur parfaitement agité développé à l'ICARE. Les expériences ont été menées entre 560 et 1110 K, à haute pression (10 atm), pour trois richesses de mélange (0,5, 1 et 2) et pour un temps de passage constant de 0,7 s.

Le mélange modèle #1 et le mélange modèle #2 ont pour formule chimique globale $C_{10}H_{21,96}$. Pour comparer l'oxydation de plusieurs carburants, il est primordial d'injecter au sein du réacteur une quantité de carbone identique. Le SPK ayant une formule globale de $C_{11,5}H_{24,41}$, il a fallu injecter 1150 ppm de carburant modèle pour obtenir les 11500 ppm de carbone introduit avec 1000 ppm de SPK (Tableau VI.9).

Tableau VI.9 : Conditions expérimentales pour l'oxydation des mélanges modèles du SPK

	Richesse	X_{HC} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Pression (atm)	Temps de passage (s)	Température (K)
Mélange #1	0,5	$1{,}15.10^{-3}$	$28{,}75.10^{-3}$	$9{,}70100.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1100
	1	$1{,}15.10^{-3}$	$14{,}38.10^{-3}$	$9{,}84470.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1110
	2	$1{,}15.10^{-3}$	$7{,}188.10^{-3}$	$9{,}91662.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1110
Mélange #2	0,5	$1{,}15.10^{-3}$	$28{,}75.10^{-3}$	$9{,}70100.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1100
	1	$1{,}15.10^{-3}$	$14{,}38.10^{-3}$	$9{,}84470.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1110
	2	$1{,}15.10^{-3}$	$7{,}188.10^{-3}$	$9{,}91662.10^{-1}$	10	0,7	560 - 1110

6.2.1.2 *Résultats expérimentaux*

Au cours de ces expériences menées en réacteur auto-agité sur ces deux mélanges, nous avons pu observer les trois régimes d'oxydation constatés lors de l'oxydation du SPK : la flamme froide, le coefficient négatif de température et le domaine de haute température. Nos moyens d'analyse nous ont permis d'identifier et de quantifier une large gamme de composés en sortie du réacteur. Nous avons ainsi pu suivre l'évolution d'un grand nombre d'espèces formées au cours de l'oxydation, ainsi que celle de destruction des réactifs. Ces espèces sont majoritairement les mêmes que celles mesurées dans nos expériences précédentes comme le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'eau, l'éthylène, le formaldéhyde, le méthane, le propène, l'acétaldéhyde et l'hydrogène, ainsi qu'un grand nombre d'oléfines et d'aldéhydes.

6.2.1.3 *Comparaison expérimentale kérosène-mélanges*

Sur les figures VI.6, VI.7 et VI.8 sont présentés respectivement les résultats obtenus pour l'oxydation du mélange modèle #1 à $\varphi = 0{,}5$, $\varphi = 1$ et $\varphi = 2$. Sur la figure VI.9 sont présentés les résultats obtenus pour l'oxydation du mélange modèle #2 uniquement dans les conditions stœchiométriques. L'ensemble de ces résultats est comparé aux résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation du SPK dans les mêmes conditions.

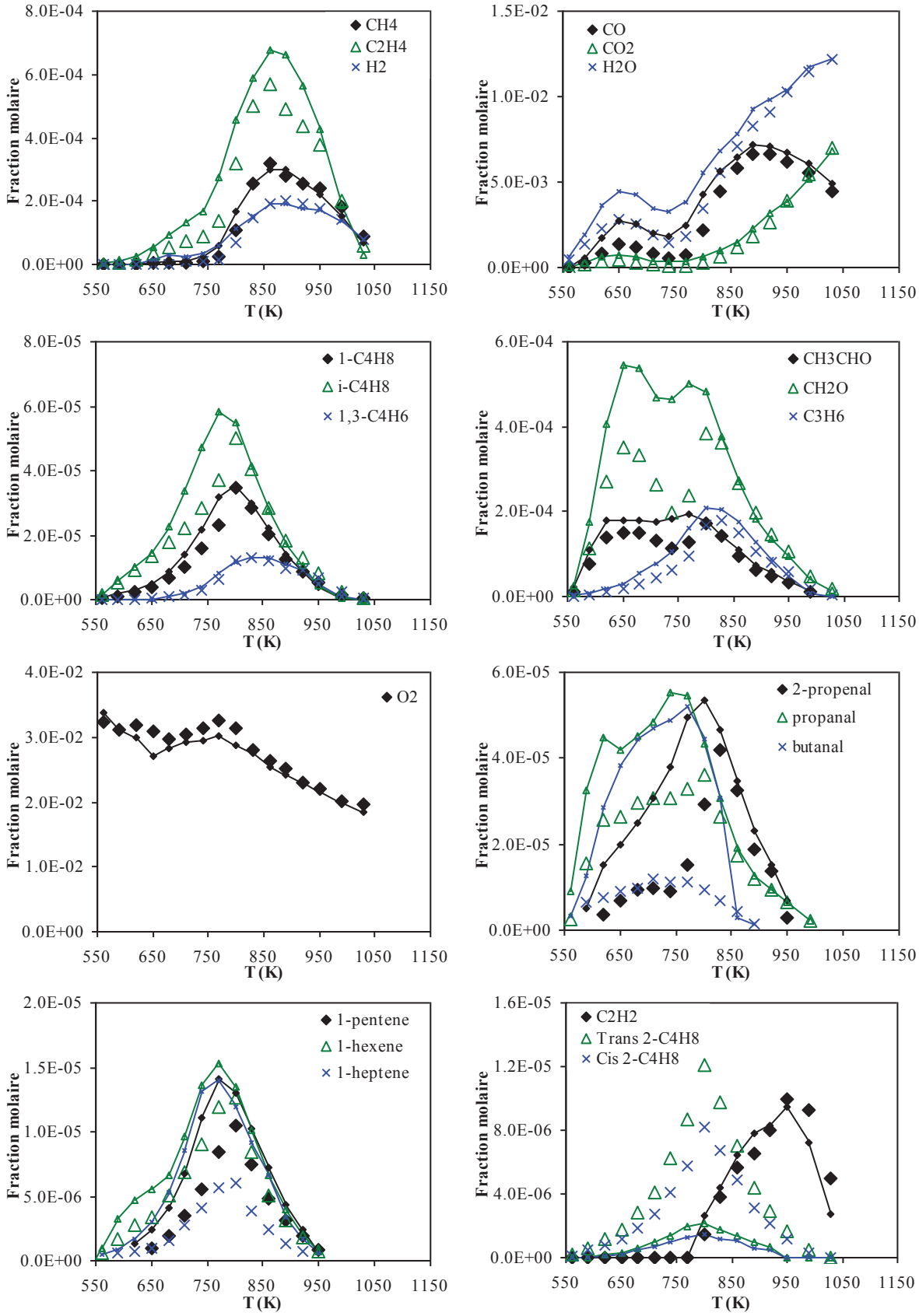


Figure VI.6 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #1 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=0,5 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,115% (80% 2-méthylnonane ; 19,5% n-décane ; 0,5% n-butylbenzène) avec l'oxydation du SPK dans les mêmes conditions (larges symboles).

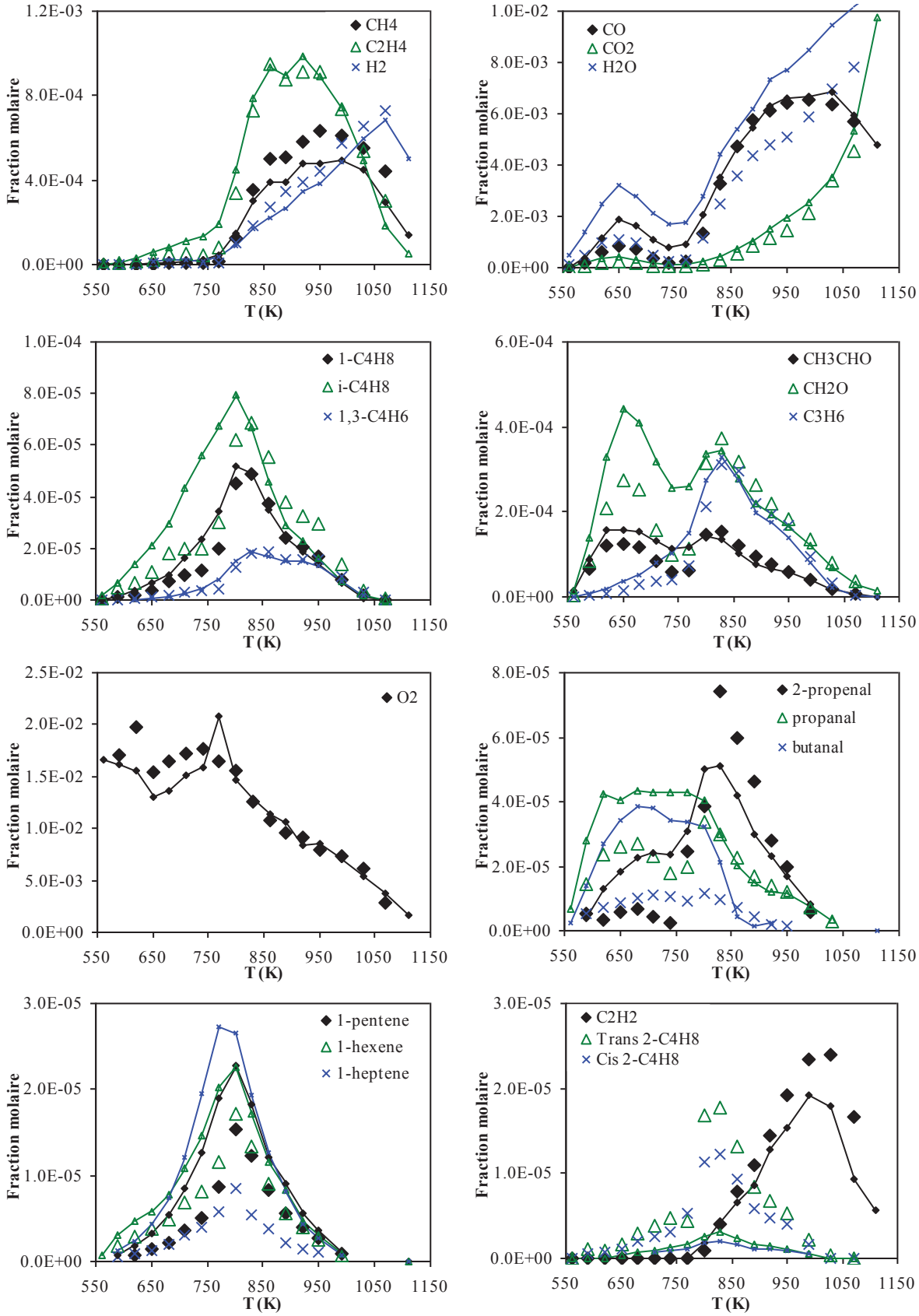


Figure VI.7 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #1 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,115% (80% 2-méthylnonane ; 19,5% n-décane ; 0,5% n-butylbenzène) avec l'oxydation du SPK dans les mêmes conditions (larges symboles).

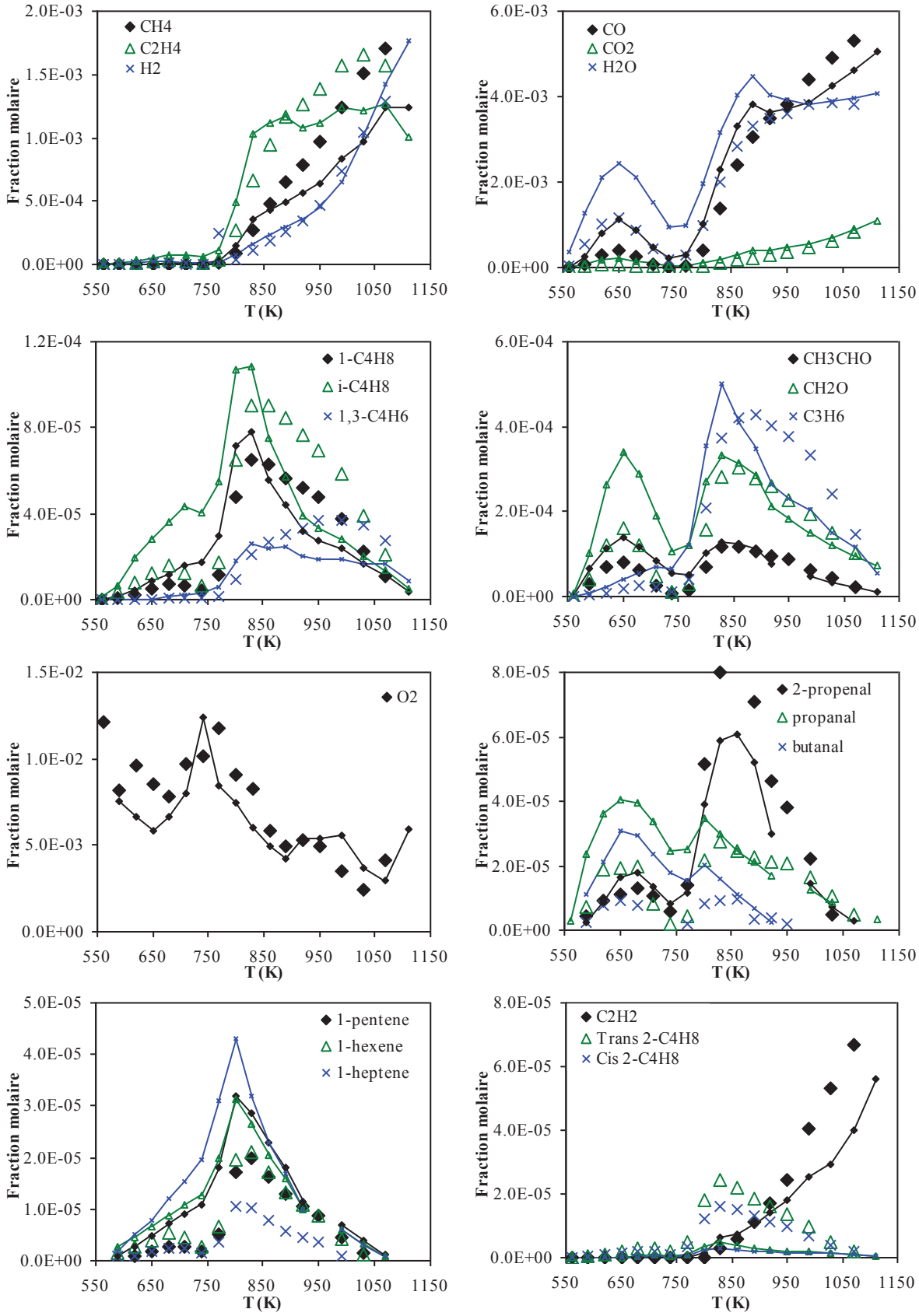


Figure VI.8 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #1 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,115% (80% 2-méthylnonane ; 19,5% n-décane ; 0,5% n-butylbenzène) avec l'oxydation du SPK dans les mêmes conditions (larges symboles).

On peut ainsi voir sur les figures VI.6, VI.7 et VI.8, les profils des fractions molaires en fonction de la température de quelques espèces majoritaires. Par comparaison des profils du mélange #1 avec ceux du kérosène synthétique, on peut voir que le mélange modèle est bien plus réactif que le SPK. Cela s'observe sur les profils de nombreuses espèces telles que l'eau, le CO et le formaldéhyde pour lesquelles on peut voir une production plus importante dans le cas du mélange #1, notamment à basse température. On remarque de plus une formation d'un certain nombre d'intermédiaires plus lourds (pent-1-ène, hex-1-ène, hept-1-ène) ou oxygénés (propanal, butanal, propen-2-al) nettement supérieure lors de l'oxydation du mélange. On peut voir des tendances similaires sur les profils entre les trois richesses. On remarque en revanche que les quantités de but-1-ène, d'isobutène et de buta-1,3-diène sont quasiment identiques lors de l'oxydation du kérosène et du mélange modèle.

Dans la deuxième phase de ces expériences nous avons préparé un nouveau mélange modèle avec des proportions de n-décane et de 2-méthylnonane inversées, afin de vérifier l'influence du ratio n-alcanes/iso-alcanes sur la réactivité des mélanges ainsi que sur la formation des différents intermédiaires stables. Ces résultats ont également été comparés à ceux obtenus pour l'oxydation du SPK dans les mêmes conditions. Cette nouvelle confrontation est présentée sur la figure VI.9. Entre les trois richesses, on peut également voir les mêmes tendances sur les profils donc seulement les résultats obtenus avec des mélanges stœchiométriques sont présentés. On peut voir sur cette figure que l'augmentation de la proportion de n-décane dans le mélange #2 a pour conséquence un accroissement supplémentaire de la réactivité du mélange. En effet la présence de la ramification du 2-méthylnonane induit une légèrement diminution de la réactivité du mélange. On peut vérifier cette caractéristique par les indices de cétane de ces molécules qui sont un bon indicateur de leur réactivité. En effet, comme on a pu le voir précédemment, le SPK possède un indice de cétane de 45,45. Or, celui du 2-méthylnonane étant d'environ 55 [1] et celui du n-décane de 77 [2], l'indice de cétane calculé des mélanges #1 et #2 est respectivement de 59 et de 72. Ainsi, on peut en déduire que tout mélange de ces deux hydrocarbures sera trop réactif pour représenter l'oxydation du SPK. De plus, la diminution de la proportion du 2-méthylnonane a considérablement fait baisser la quantité d'isobutène formée au cours de la combustion du mélange #2.

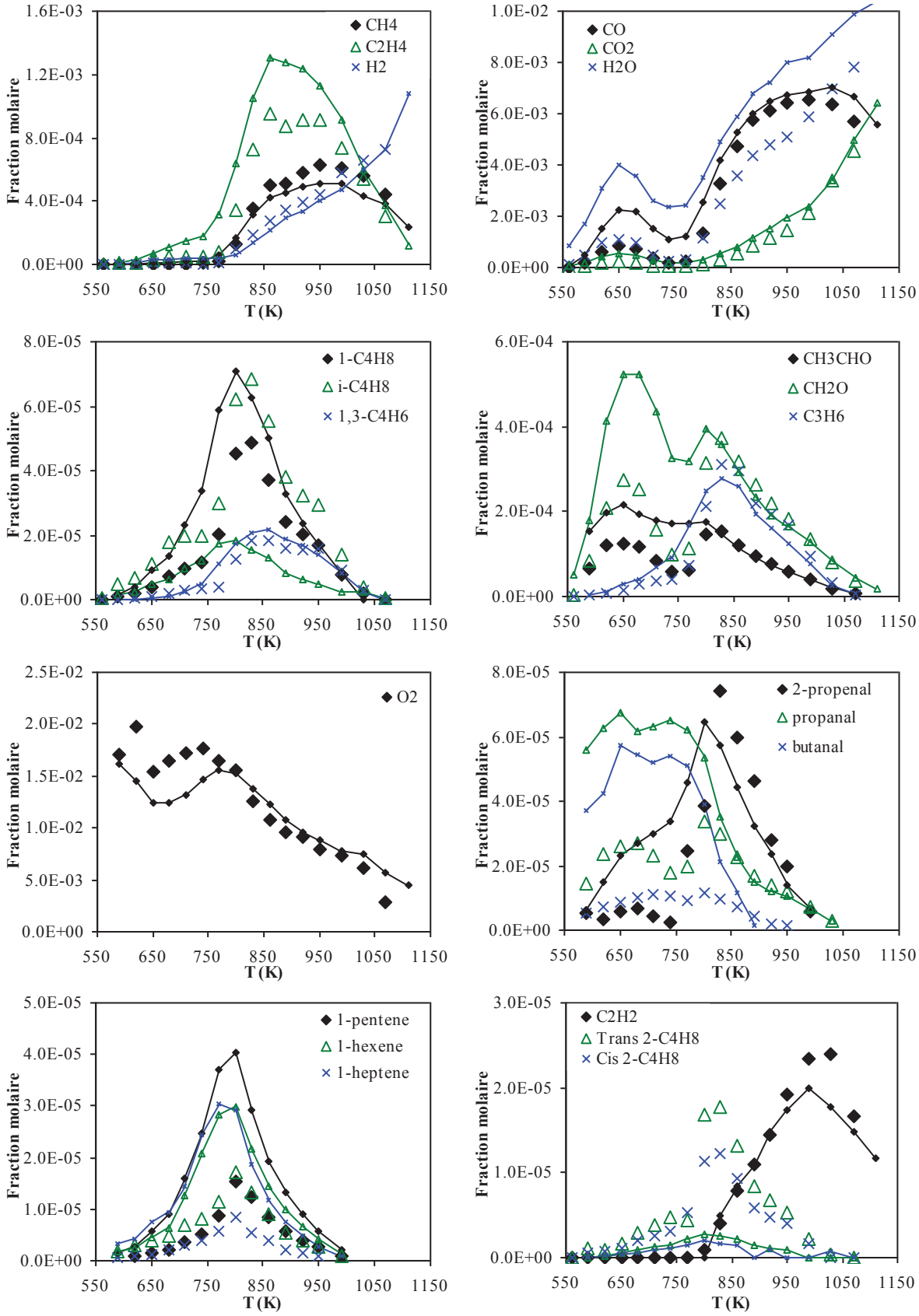


Figure VI.9 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #2 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,115% (19,5% 2-méthylnonane ; 80% n-décane ; 0,5% n-butylbenzène) avec l'oxydation du SPK dans les mêmes conditions (larges symboles)

L'étude de ces deux mélanges a ainsi pu nous montrer que le 2-méthylnonane est une molécule trop réactive associée au n-décane pour représenter respectivement les iso-alcanes et les n-alcanes. Cette molécule n'est donc pas un bon candidat pour représenter la famille des iso-paraffines dans un kérosène de synthèse.

6.2.2 Oxydation de mélanges modèles du GtL

Dans cette partie, nous présentons les résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation de deux mélanges d'hydrocarbures modèles représentant l'oxydation du kérosène de synthèse de type GtL. Le premier mélange (mélange #0) correspond à celui développé dans le cadre d'une précédente étude d'oxydation [3] effectuée sur ce même GtL. Ce modèle, composé de n-décane, d'iso-octane et de n-propylcyclohexane (Tableau VI.10) pour représenter la majeure partie des familles chimiques présentes dans le GtL, avait été développé uniquement pour la modélisation. Il a ainsi été intéressant d'oxyder ce mélange modèle expérimentalement afin de comparer les résultats obtenus avec les résultats de simulations. Puis, nous avons développé un nouveau mélange (mélange #1) dans lequel nous avons décidé de remplacer le n-propylcyclohexane par de la décaline (Tableau VI.11), la composition du GtL montrant que la majeure partie des naphtènes présents sont des di-naphtènes. Dans le but d'analyser l'utilité du remplacement de cette espèce, aucune autre modification n'a été apportée au mélange modèle, notamment pour les iso-paraffines. La composition de ce mélange est détaillée dans le tableau VI.11.

On peut remarquer que dans ces deux mélanges les quantités de n-alcanes et d'iso-alcanes sont inversées par rapport à la composition réelle du GtL (Voir précédemment 6.1.2). Cette inversion de proportion a été effectuée afin de faire correspondre les indices de cétane de ces mélanges, et ainsi leur réactivité avec celle du GtL (CN : 57,94). En effet, les indices de cétanes des hydrocarbures présents dans les mélanges étant de 77 pour le n-décane, 12 pour l'iso-octane, 52 pour le n-propylcyclohexane et de 48 pour la décaline, les indices de cétane estimés pour les mélanges #0 et #1 sont respectivement de 54,6 et 54,4 [2].

Tableau VI.10 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du mélange modèle #0 pour représenter l'oxydation du GtL [3]

	formule chimique	fraction massique (%)	fraction molaire (%)	concentration (ppm)
n-décane	$C_{10}H_{22}$	62,4	57,7	652
iso-octane	C_8H_{18}	28,8	33,2	375
n-propylcyclohexane	C_9H_{18}	8,8	9,1	103
Caractéristiques physico-chimiques	$C_{9,24}H_{20,31}$; H/C : 2,20 ; CN : 54,6			

Tableau VI.11 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du mélange modèle #1 pour représenter l'oxydation du GtL

	formule chimique	fraction massique (%)	fraction molaire (%)	concentration (ppm)
n-décane	$C_{10}H_{22}$	62,4	58	650
iso-octane	C_8H_{18}	28,8	33,5	375
décaline	$C_{10}H_{18}$	8,8	8,5	95
Caractéristiques physico-chimiques	$C_{9,33}H_{20,32}$; H/C : 2,18 ; CN : 54,4			

6.2.2.1 *Conditions expérimentales*

L'oxydation des deux mélanges modèles #0 et #1 a été étudiée expérimentalement en réacteur auto-agité par jets gazeux dans un large domaine de températures ($560 \leq T\ (K) \leq 1110$), à haute pression (10 atm) et pour une richesse de 1. Dans nos expériences le temps de passage a été maintenu constant à τ=0,7 s.

Le mélange #0 a pour formule globale $C_{9,24}H_{20,31}$, or, pour 1000 ppm de GtL injecté, 10450 ppm de carbone ont été introduis. Ainsi nous avons dû introduire 1130 ppm de ce mélange modèle afin de pouvoir comparer les profils de concentrations mesurés. Le mélange #1 a quant à lui pour formule globale $C_{9,33}H_{20,32}$, Il a donc fallu injecter 1120 ppm de ce mélange modèle pour obtenir la même quantité de carbone qu'avec le GtL. Les conditions expérimentales pour l'étude de l'oxydation de ces mélanges sont répertoriées dans le tableau VI.12.

Tableau VI.12 : Conditions expérimentales pour l'oxydation des mélanges modèles du GtL

	Richesse	**X_{HC} initiale**	**X_{O2} initiale**	**X_{N2} initiale**	**Pression (atm)**	**Temps de passage (s)**	**Température (K)**
Mélange #0	1	$1{,}13.10^{-3}$	$16{,}184.10^{-3}$	$9{,}82686.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110
Mélange #1	1	$1{,}12.10^{-3}$	$16{,}139.10^{-3}$	$9{,}82741.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110

6.2.2.2 *Résultats expérimentaux*

Nous avons pu observer lors des expériences d'oxydation menées avec ces deux mélanges modèles, les trois régimes d'oxydation observés lors de l'oxydation du GtL : la flamme froide, le coefficient négatif de température et le domaine de haute température. Grâce aux différents dispositifs d'analyse nous avons pu identifier et quantifier une large gamme de composés en sortie du réacteur. Nous avons ainsi pu suivre l'évolution de la formation d'un grand nombre de produits et intermédiaires, ainsi que la destruction des réactifs présents initialement. Majoritairement, ces espèces sont les mêmes que celles mesurées dans nos expériences précédentes comme le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'eau, l'éthylène, le formaldéhyde, le méthane, le propène, l'acétaldéhyde et l'hydrogène, ainsi qu'un grand nombre d'oléfines, d'aromatiques et de composés oxygénés.

6.2.2.3 *Comparaison expérimentale kérosène-mélange*

Sur les figures VI.10 et VI.11 sont présentés respectivement les résultats obtenus pour l'oxydation du mélange modèle #0 et du mélange modèle #1 à $\varphi = 1$. L'ensemble de ces résultats est comparé aux résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation du GtL dans les mêmes conditions.

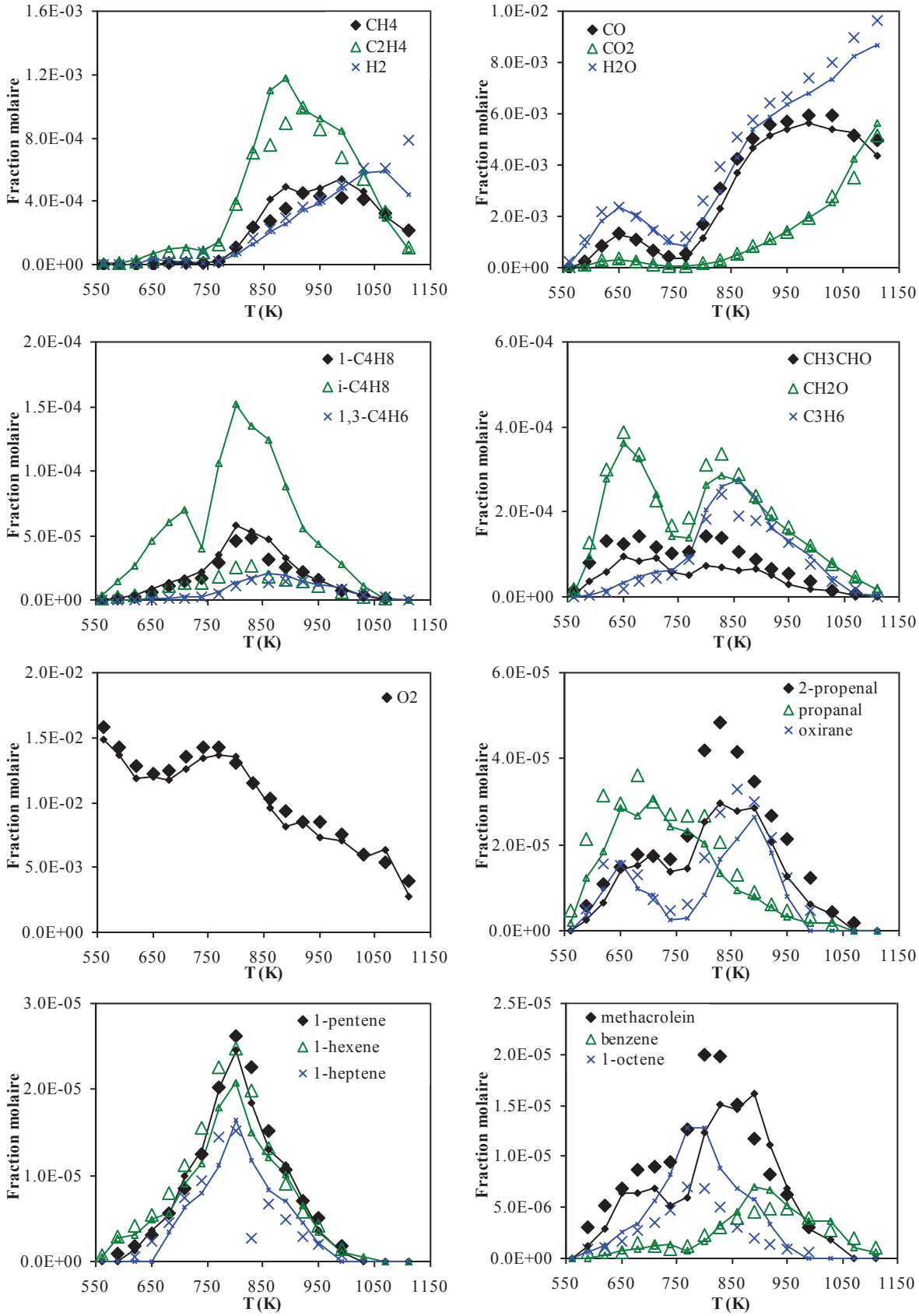


Figure VI.10 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #0 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,113% (62,4% n-décane ; 28,8% iso-octane ; 8,8% n-propylcyclohexane) avec l'oxydation du GtL dans les mêmes conditions (larges symboles)

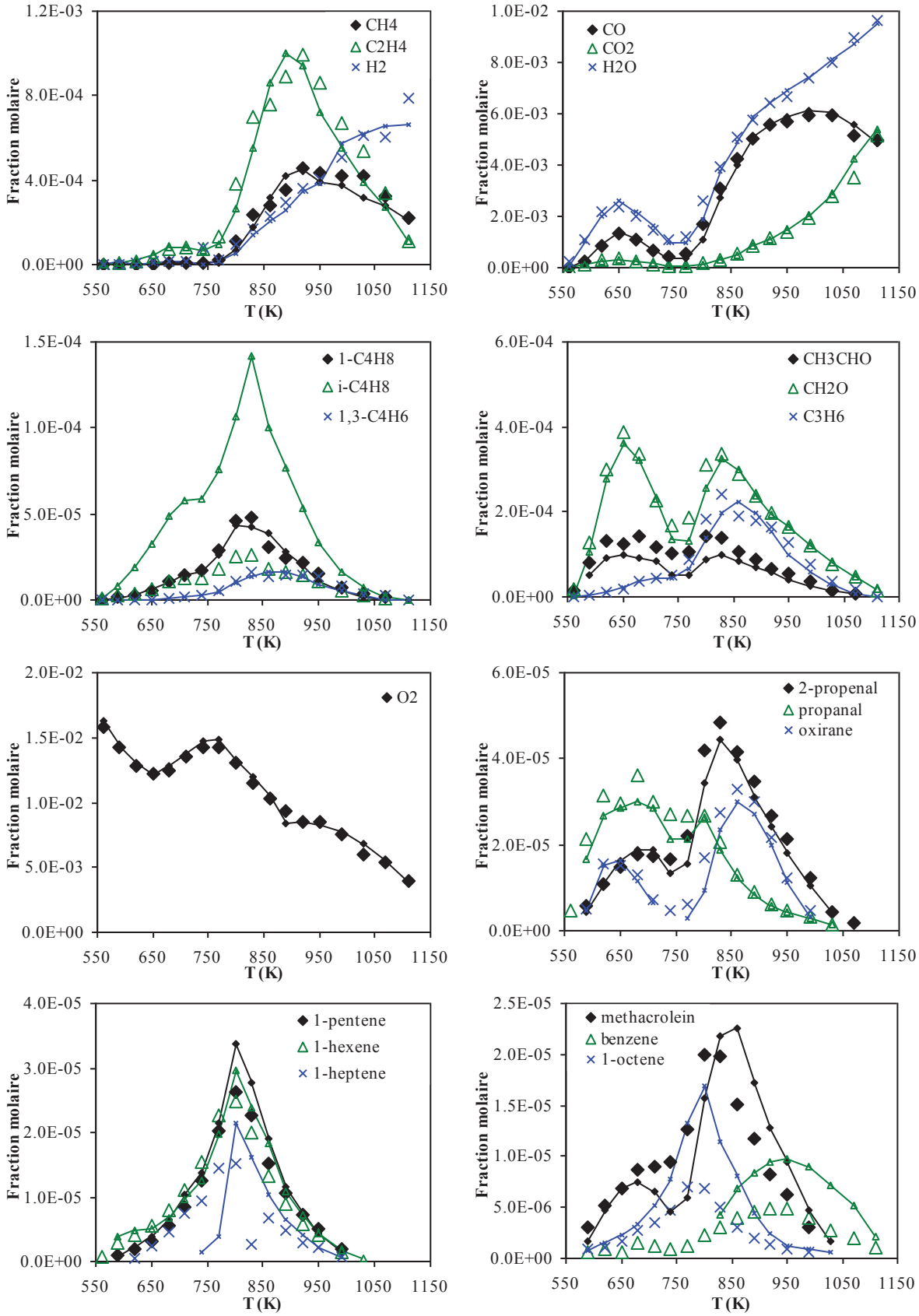


Figure VI.11 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #1 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,112% (62,4% n-décane ; 28,8% iso-octane ; 8,8% décaline) avec l'oxydation du GtL dans les mêmes conditions (larges symboles)

Ces résultats sont les profils des fractions molaires, mesurées en fonction de la température, pour quelques réactifs, produits et intermédiaires stables. On y observe que les deux mélanges modèles reproduisent correctement l'oxydation du GtL pour la majeure partie des espèces, à l'exception de l'isobutène qui est quatre fois plus formé par rapport au GtL. Ceci vient des proportions de n-décane et d'iso-octane dans les mélanges, inversées par rapport à la composition du GtL pour faire correspondre la réactivité de ces mélanges. On peut vérifier cela sur les profils, sur lesquels on remarque une bonne reproduction de la réactivité du GtL par les mélanges. Or, l'isobutène étant essentiellement formé par la décomposition de l'iso-octane dans ces mélanges, il faudrait diminuer d'environ quatre fois la quantité d'iso-octane injecté pour former la bonne quantité d'isobutène. La quantité d'iso-octane retirée devrait ainsi être complétée avec du n-décane et de cette façon cela augmenterait la réactivité du mélange. Cela signifie qu'il faudrait un modèle avec une composition encore plus lointaine de celle du GtL, ce qui détériorerait la plupart des profils en augmentant la réactivité.

On ne remarque pas de grande différence entre les profils obtenus avec les deux mélanges, mis à part une très légère diminution de la quantité maximale formée de quelques intermédiaires lors de l'oxydation du mélange #1, comme l'éthylène, le propène, le but-1-ène ou le pent-1-ène. En revanche on peut voir une légère augmentation de la formation du benzène par l'ajout de décaline au mélange.

On notera que par la suite, nous avons tenté de nous rapprocher de la composition du GtL, tout en conservant la même réactivité et la même reproduction de l'ensemble des profils d'espèces, y compris celui de l'isobutène. Cela a été possible en remplaçant l'iso-octane par un mélange de 2-méthylheptane et de 3-méthylheptane. Cependant, à cause de la disponibilité et du coût de ces composés, nous n'avons pas pu tester ces mélanges expérimentalement.

6.2.3 Oxydation de mélanges modèles du CtL

Les résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation de trois mélanges modèles représentant un kérosène de synthèse de type CtL sont présentés dans cette partie. Le premier, appelé mélange #0, a été développé dans une précédente étude [4] sur ce même CtL mais n'a jamais été oxydé expérimentalement. Celui-ci est composé de n-décane, d'iso-octane, de n-

propylcyclohexane et de n-propylbenzène (Tableau VI.13) pour représenter la majeure partie des familles chimiques présentes dans le CtL. Il est intéressant d'oxyder ce mélange modèle expérimentalement afin de comparer les résultats expérimentaux avec les simulations. Nous avons ensuite choisi de remplacer, dans le mélange #1, une partie du n-propylcyclohexane par de la décaline afin de se rapprocher de la composition du CtL (Tableau VI.14). Aucune autre modification n'a été effectuée pour ce mélange. Puis, nous avons développé un dernier mélange (mélange #2), dans lequel nous avons modifié la fraction de chacun des composés (Tableau VI.15) afin de se rapprocher de la composition du CtL fourni par Sasol, et ainsi de reproduire la réactivité de ce dernier, largement surestimée par les mélanges #0 et #1.

En effet, on peut constater que les deux premiers mélanges, contrairement à ceux du GtL, n'ont pas été développés dans le but de reproduire la réactivité du CtL (CN : 32,7). Les indices de cétane des hydrocarbures seuls présents dans ces mélanges étant de 77 pour le n-décane, 12 pour l'iso-octane, 52 pour le n-propylcyclohexane, 48 pour la décaline et de 10 pour le n-propylbenzène, nous avons pu calculer les indices de cétane de ces deux mélanges qui sont de 52,9 pour le mélange #0 et de 52 pour le mélange #1 [2]. Enfin, le mélange #2 a été développé afin de reproduire la réactivité du CtL ; son indice de cétane (calculé) est de 36,2.

Tableau VI.13 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du mélange modèle #0 pour représenter l'oxydation du CtL [4]

	formule chimique	**fraction massique (%)**	**fraction molaire (%)**	**concentration (ppm)**
n-décane	$C_{10}H_{22}$	43,1	39,53	472
iso-octane	C_8H_{18}	11,4	12,98	155
n-propylcyclohexane	C_9H_{18}	36,1	37,27	445
n-propylbenzène	C_9H_{12}	9,4	10,22	122
Caractéristiques physico-chimiques	$C_{9,27}H_{18,97}$; H/C : 2,04 ; CN : 52,9			

Tableau VI.14 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du mélange modèle #1 pour représenter l'oxydation du CtL

	formule chimique	fraction massique (%)	fraction molaire (%)	concentration (ppm)
n-décane	$C_{10}H_{22}$	43,1	40,4	470
iso-octane	C_9H_{18}	11,4	13,28	155
n-propylcyclohexane	C_8H_{18}	12,1	12,75	148
décaline	$C_{10}H_{18}$	24	23,12	269
n-propylbenzène	C_9H_{12}	9,4	10,45	122
Caractéristiques physico-chimiques	$C_{9,5}H_{18,99}$; H/C : 1,99 ; CN : 52			

Tableau VI.15 : Composition et caractéristiques physico-chimiques du mélange modèle #2 pour représenter l'oxydation du CtL

	formule chimique	fraction massique (%)	fraction molaire (%)	concentration (ppm)
n-décane	$C_{10}H_{22}$	15	13,4	163
iso-octane	C_9H_{18}	27	30	365
n-propylcyclohexane	C_8H_{18}	16,1	16,2	197
décaline	$C_{10}H_{18}$	28,3	26	317
n-propylbenzène	C_9H_{12}	13,6	14,4	175
Caractéristiques physico-chimiques	$C_{9,09}H_{17,67}$; H/C : 1,94 ; CN : 36,2			

6.2.3.1 *Conditions expérimentales*

Nous avons étudié expérimentalement l'oxydation des trois mélanges modèles #0, #1 et #2 en réacteur auto-agité par jets gazeux dans un large domaine de températures comprises entre 560 et 1110 K, à haute pression (10 atm) et pour une richesse de 1. Dans nos expériences le temps de passage (τ) a été maintenu constant à une de valeur de 0,7 s.

Le mélange #0 a pour formule globale $C_{9,27}H_{18,97}$. Pour représenter1000 ppm de CtL injecté, soit 11060 ppm de carbone, il a ainsi fallu injecter 1194 ppm de ce mélange modèle afin d'obtenir la même quantité de carbone dans le milieu réactionnel. Le second mélange étudié (mélange #1) a pour formule globale $C_{9,5}H_{18,99}$. Il a ainsi fallu injecter 1164 ppm de ce

mélange modèle pour obtenir la même quantité de carbone qu'avec le CtL. Enfin, le mélange #2 ayant pour formule globale $C_{9,09}H_{17,67}$, il a fallu injecter 1217 ppm de ce mélange modèle pour obtenir cette même quantité de 11060 ppm de carbone. Les conditions expérimentales détaillées pour l'oxydation de ces trois mélanges sont répertoriées dans le tableau VI.16.

Tableau VI.16 : Conditions expérimentales pour l'oxydation des mélanges modèles du CtL

	Richesse	**X_{HC} Initiale**	**X_{O2} initiale**	**X_{N2} initiale**	**Pression (atm)**	**Temps de passage (s)**	**Température (K)**
Mélange #0	1	$1{,}194.10^{-3}$	$16{,}731.10^{-3}$	$9{,}82075.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110
Mélange #1	1	$1{,}164.10^{-3}$	$16{,}584.10^{-3}$	$9{,}82252.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110
Mélange #2	1	$1{,}217.10^{-3}$	$16{,}439.10^{-3}$	$9{,}82344.10^{-1}$	10	0,7	560 – 1110

6.2.3.2 *Résultats expérimentaux*

Au cours des expériences menées sur ces trois mélanges modèles, nous avons pu observer les trois régimes d'oxydation observés lors de l'oxydation du CtL : la flamme froide, le coefficient négatif de température et le domaine de haute température. Les dispositifs analytiques disponibles nous ont permis d'identifier et de quantifier une large gamme de composés en sortie du réacteur. De cette façon, nous avons été en mesure de suivre l'évolution de la formation d'un grand nombre de composés, ainsi que l'évolution de la consommation des réactifs. Ces espèces sont majoritairement les mêmes que celles mesurées au cours de nos expériences précédentes comme le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'eau, l'éthylène, le formaldéhyde, le méthane, le propène, l'acétaldéhyde et l'hydrogène, ainsi qu'un grand nombre d'oléfines, d'aromatiques et de composés oxygénés.

6.2.3.3 *Comparaison expérimentale kérosène-mélange*

Sur les figures VI.12, VI.13 et VI.14 sont présentés respectivement les résultats obtenus pour l'oxydation des mélanges modèles #0, #1 et #2 à $\varphi = 1$. L'ensemble de ces résultats est comparé aux résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation du CtL dans les mêmes conditions.

Ces résultats sont des profils de fractions molaires, mesurées en fonction de la température, de quelques espèces majoritaires obtenus lors de l'oxydation des trois mélanges modèles, ainsi que du CtL. On peut y vérifier sur les profils de l'eau, du monoxyde de carbone et du formaldéhyde que les mélanges #0 et #1 sont beaucoup plus réactifs que le CtL, notamment dans la zone de basse température. Ces deux mélanges présentent donc une quantité de n-décane trop importante. Cependant, on peut voir que l'ajout de décaline diminue sensiblement cette réactivité à basse température. Quelques intermédiaires sont également légèrement trop formés par rapport au CtL comme l'éthylène ou le but-1-ène. Sur les profils du mélange #2, on peut voir que la modification des proportions de n-décane et d'iso-octane, en diminuant la quantité de n-décane, permet de baisser la réactivité de ce mélange, ce qui améliore la représentation de l'oxydation du CtL pour la majeure partie des espèces. Cette amélioration se voit notamment sur les profils de l'eau, du monoxyde de carbone et du formaldéhyde à basse température. Cependant, l'augmentation de la quantité initiale d'iso-octane entraîne une formation beaucoup trop importante d'isobutène. Ceci indique une fois de plus la nécessité de rechercher d'autres molécules plus représentatives des carburants de synthèse, notamment pour les iso-paraffines.

Dans les mélanges modèles suivants, nous avons essayé de trouver une composition de mélange se rapprochant de celle du CtL, tout en reproduisant au mieux les profils d'espèces en ayant une réactivité proche du kérosène de synthèse. Cela a été effectué en ajoutant de la tétraline et du 3-méthylheptane. Cependant, nous n'avons pas pu tester ces mélanges expérimentalement à cause de la faible disponibilité et des coûts de ces composés.

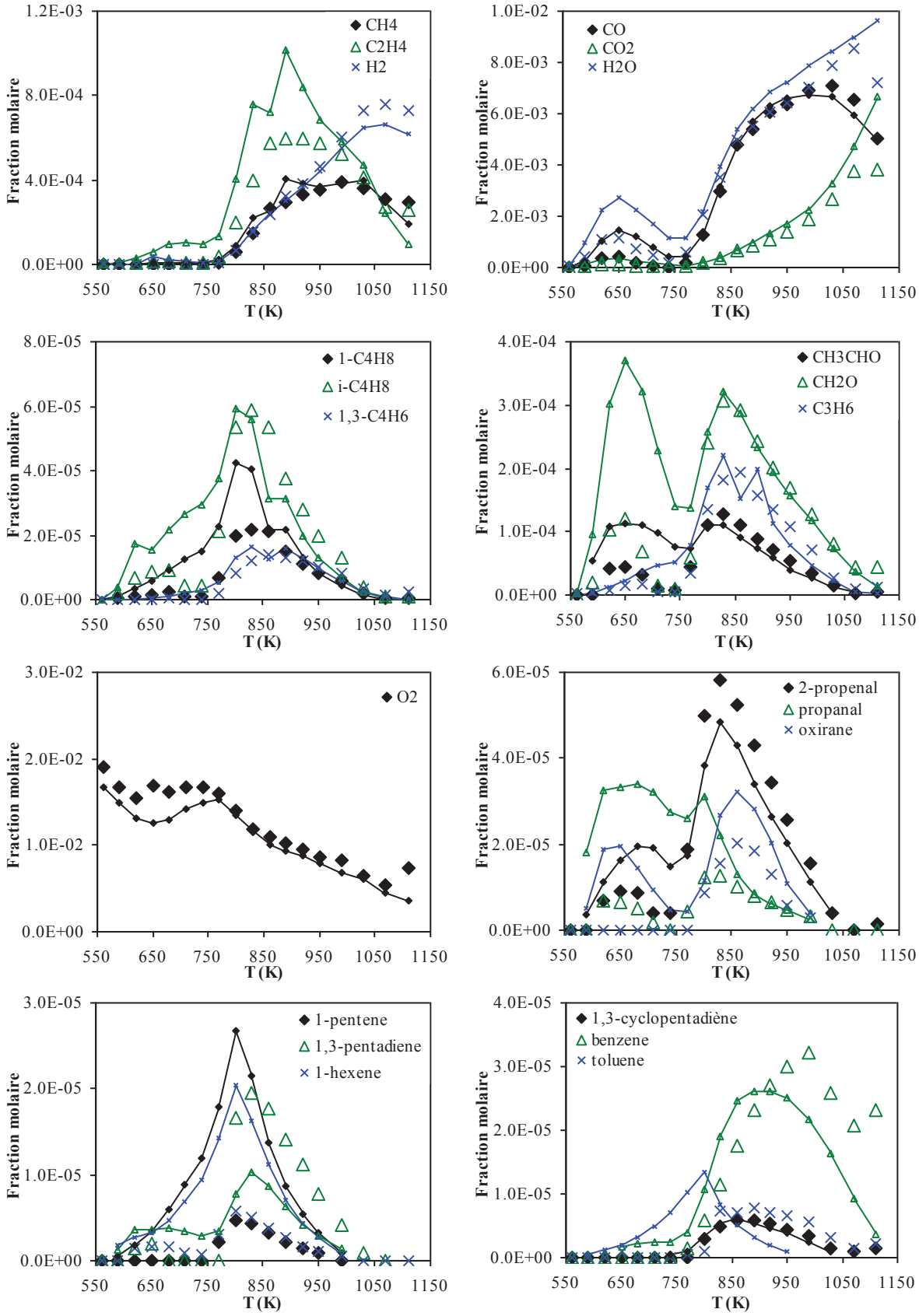


Figure VI.12 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #0 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1194% (43,1% n-décane ; 11,4% iso-octane ; 36,1% n-propylcyclohexane ; 9,4% n-propylbenzène) avec l'oxydation du CtL dans les mêmes conditions (larges symboles)

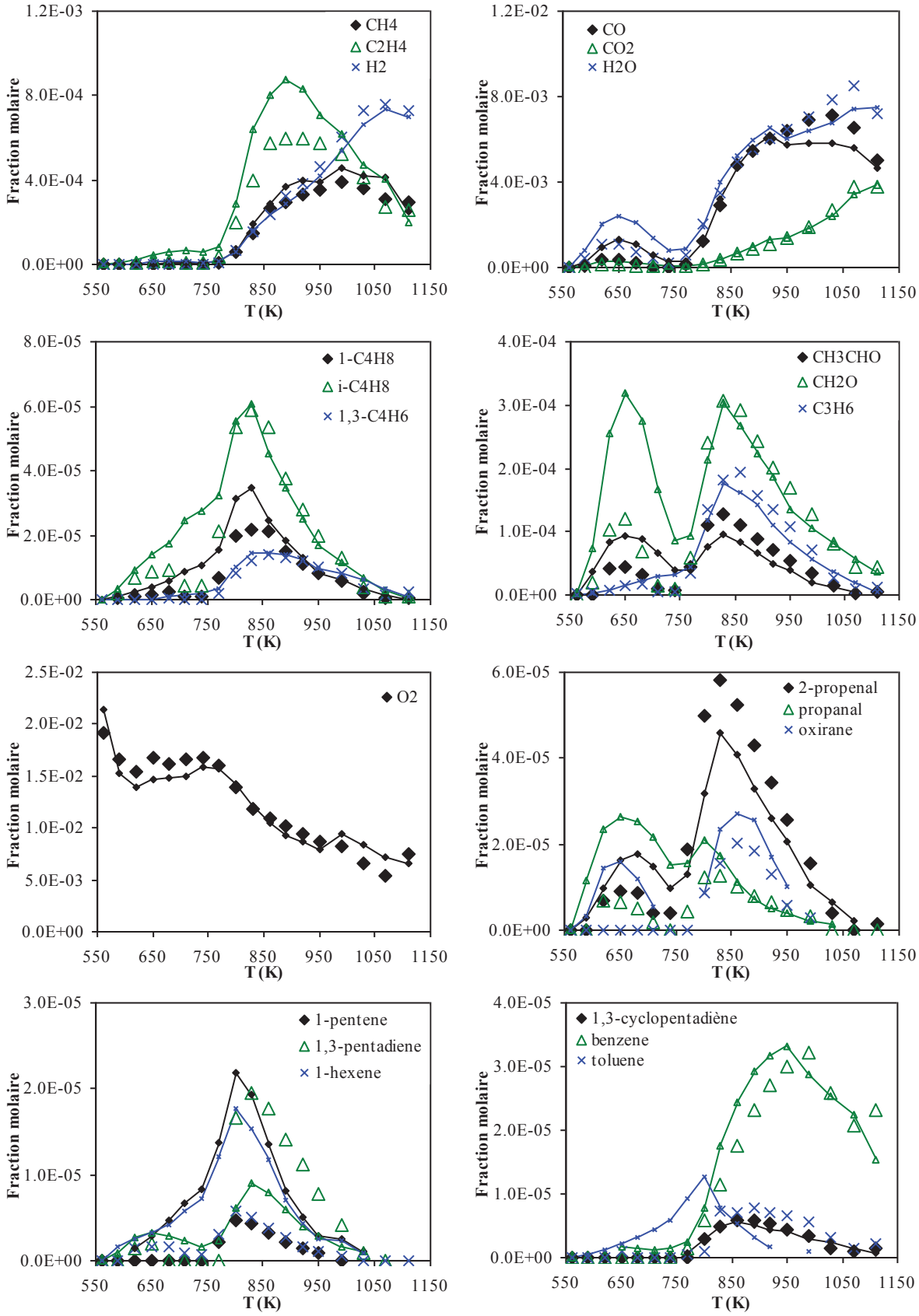


Figure VI.13 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #1 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1164% (43,1% n-décane ; 11,4% iso-octane ; 12,1% n-propylcyclohexane ; 24% décaline ; 9,4% n-propylbenzène) avec l'oxydation du CtL dans les mêmes conditions (larges symboles)

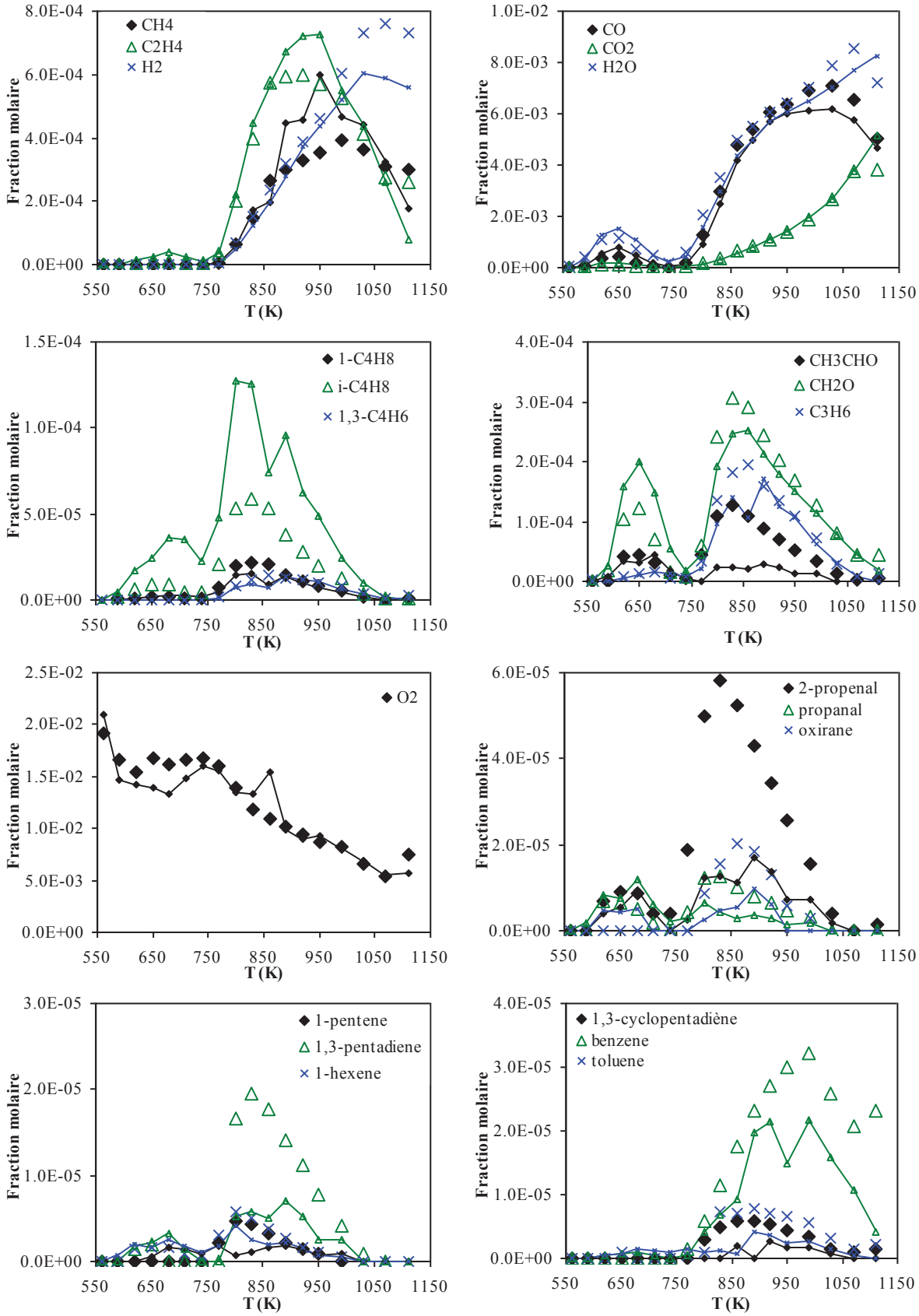


Figure VI.14 : Comparaison de l'oxydation du mélange modèle #2 (lignes et petits symboles) en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7 s ; X_{HC}=0,1217% (15% n-décane ; 27% iso-octane ; 16,1% n-propylcyclohexane ; 28,3% décaline ; 13,6% n-propylbenzène) avec l'oxydation du CtL dans les mêmes conditions (larges symboles)

6.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les études expérimentales menées en réacteur auto-agité sur l'oxydation de trois kérosènes de synthèse produits par la synthèse Fischer-Tropsch : un SPK, un GtL et un CtL. Nous avons ensuite procédé à l'étude expérimentale de la cinétique d'oxydation de mélanges modèles développés pour représenter l'oxydation de ces trois kérosènes synthétiques.

Les mélanges modèles représentant l'oxydation du SPK ont été développés dans le but de trouver un composé pour représenter la famille chimique des iso-paraffines, et ainsi remplacer l'iso-octane utilisé jusqu'à présent. Cependant, le 2-méthylnonane choisi ici s'est révélé beaucoup trop réactif pour représenter cette famille dans un kérosène de synthèse.

Les résultats obtenus pour l'étude des mélanges représentant le GtL et le CtL ont eu pour but d'améliorer le modèle existant en se rapprochant de la composition de départ du kérosène étudié. Pour cela, le n-propylcyclohexane a été remplacé par de la décaline, en partie pour le CTL et totalement pour le GTL. Cependant, pas de différences notoires ont été observées par l'ajout de cette espèce, hormis une légère baisse de la réactivité. Un troisième mélange a été développé pour représenter l'oxydation du CtL en modifiant la proportion de chacun des composés avec pour but de mieux reproduire la réactivité de ce kérosène. Cela a entrainé une amélioration de la concordance des profils d'espèces à l'exception de l'isobutène.

Il a ainsi été montré que pour améliorer ces mélanges modèles il est nécessaire de se rapprocher de la composition de ces kérosènes en ajoutant ou en remplaçant plusieurs composés dans les mélanges modèles, comme de la tétraline, du 2-méthylheptane ou du 3-méthylheptane. Cependant, ces mélanges plus complexes n'ont pas pu être testés expérimentalement en raison de la disponibilité et du coût des hydrocarbures.

Ces études permettront de valider le modèle cinétique sur des résultats d'expériences impliquant des mélanges de compositions parfaitement connues et représentatives de celles des carburéacteurs étudiés ici. Ensuite, ces modèles cinétiques seront appliqués à la

modélisation de mélanges plus complexes et plus représentatifs des carburéacteurs de synthèse.

Références bibliographiques

[1] R. C. Santana, P. T. Do, M. Santikunaporn, W. E. Alvarez, J. D. Taylor, E. L. Sughrue, D. E. Resasco

Evaluation of different reaction strategies for the improvement of cetane number in diesel fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 643–656

[2] M. J. Murphy, J. D. Taylor, R. L. McCormick

Compendium of Experimental Cetane Number Data, NREL Final report, 2004, SR-540-36805

[3] P. Dagaut, F. Karsenty, G. Dayma, P. Diévart, K. Hadj-Ali, A. Mzé-Ahmed, M. Braun-Unkhoff

Experimental and Detailed Kinetic Model for the Oxidation of a Gas to Liquid (GtL) Jet Fuel, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 835-847

[4] A. Mzé-Ahmed, P. Dagaut, K. Hadj-Ali, G. Dayma, T. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia

Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study, Energy & Fuels, 2012, vol. 26, pp. 6070–6079

Chapitre VII

Modélisation cinétique de l'oxydation de mélanges modèles et de kérosènes de synthèse

7 Modélisation cinétique de l'oxydation de mélanges modèles et de kérosènes de synthèse.....219

7.1 Modélisation cinétique de l'oxydation de mélanges d'hydrocarbures 219

7.1.1 Oxydation des mélanges modèles du GtL 219

7.1.1.1 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #0..... 220

7.1.1.2 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #1..... 223

7.1.2 Oxydation des mélanges modèles du CtL 226

7.1.2.1 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #0..... 226

7.1.2.2 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #1..... 229

7.1.2.3 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #2..... 232

7.1.3 Conclusion sur la validation du modèle en mélange de composés purs .. 235

7.2 Modélisation cinétique de l'oxydation de kérosènes de synthèse..... 235

7.2.1 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse SPK 236

7.2.2 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse GtL 245

7.2.3 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse CtL 251

7.3 Conclusion 257

Références bibliographiques 259

7 Modélisation cinétique de l'oxydation de mélanges modèles et de kérosènes de synthèse

Ce chapitre présente dans un premier temps les résultats de la modélisation cinétique de plusieurs mélanges modèles présentés précédemment (chapitre VI) et étudiés expérimentalement en réacteur auto-agité. La modélisation de ces expériences a permis de valider le mécanisme sur des mélanges d'hydrocarbures. La deuxième partie de ce chapitre présente la modélisation de l'oxydation des trois kérosènes synthétiques purs à l'aide des mélanges modèles retenus et présentés dans le chapitre IV.

7.1 Modélisation cinétique de l'oxydation de mélanges d'hydrocarbures

Un certain nombre de mélanges d'hydrocarbures ont été étudiés expérimentalement afin de mieux comprendre l'oxydation des kérosènes de synthèse. L'oxydation des mélanges modèles a ensuite été modélisée grâce au mécanisme cinétique développé au cours de cette étude. Dans celui-ci on trouve les sous-mécanismes d'oxydation de chacune des espèces constitutives de ces carburants modèles. En revanche, les mélanges testés pour représenter le SPK n'ayant pas donné satisfaction (voir chapitre VI), l'oxydation de ceux-ci n'a pas été modélisée.

Ces études ont ainsi permis de valider le modèle cinétique sur des résultats expérimentaux impliquant des mélanges de compositions parfaitement connues et représentatives de celles des kérosènes synthétiques étudiés dans cette thèse.

7.1.1 Oxydation des mélanges modèles du GtL

Cette section présente la confrontation expérience-modèle pour chacun des mélanges d'hydrocarbures ayant pu être étudiés expérimentalement. Deux mélanges (modèle #0 et modèle #1) sont considérés ici pour représenter ce kérosène synthétique.

7.1.1.1 *Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #0*

Ce premier mélange d'hydrocarbures correspond à celui développé dans le cadre d'une précédente étude d'oxydation de ce même GtL [1]. Comme décrit dans le chapitre VI, ce mélange modèle est composé de 62,4% de n-décane, 28,8% d'iso-octane et de 8,8% de n-propylcyclohexane (en %massiques). Ce mélange a été modélisé grâce au mécanisme cinétique contenant les sous-mécanismes de chacune de ses espèces constitutives. Les conditions initiales et les fractions molaires de chacun des constituants du modèle sont répertoriées dans le tableau VII.1. Celles-ci sont identiques aux conditions et à la composition utilisées lors des expériences. La confrontation entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par modélisation de quelques intermédiaires stables et produits d'oxydation sont présentés sur la figure VII.1. Les profils de consommation des réactifs sont présentés sur la figure VII.2.

Tableau VII.1 : Conditions initiales et composition du modèle #0 (mélange expérimental et modélisation) utilisées pour la confrontation expérience-modèle du GtL.

$X_{n\text{-décane}}$	0,000652 %	0,001130 %
$X_{iso\text{-octane}}$	0,000375 %	
$X_{n\text{-propylcyclohexane}}$	0,000103 %	
X_{O2}	0,016184 %	
X_{N2}	0,982686 %	
Caractéristiques	$C_{9,24}H_{20,31}$; H/C : 2,20 ; CN : 54,6	
Conditions initiales	$\varphi = 1$; $\tau = 0,7$ s ; P = 10 atm ; $560 \leq T\ (K) \leq 1110$	

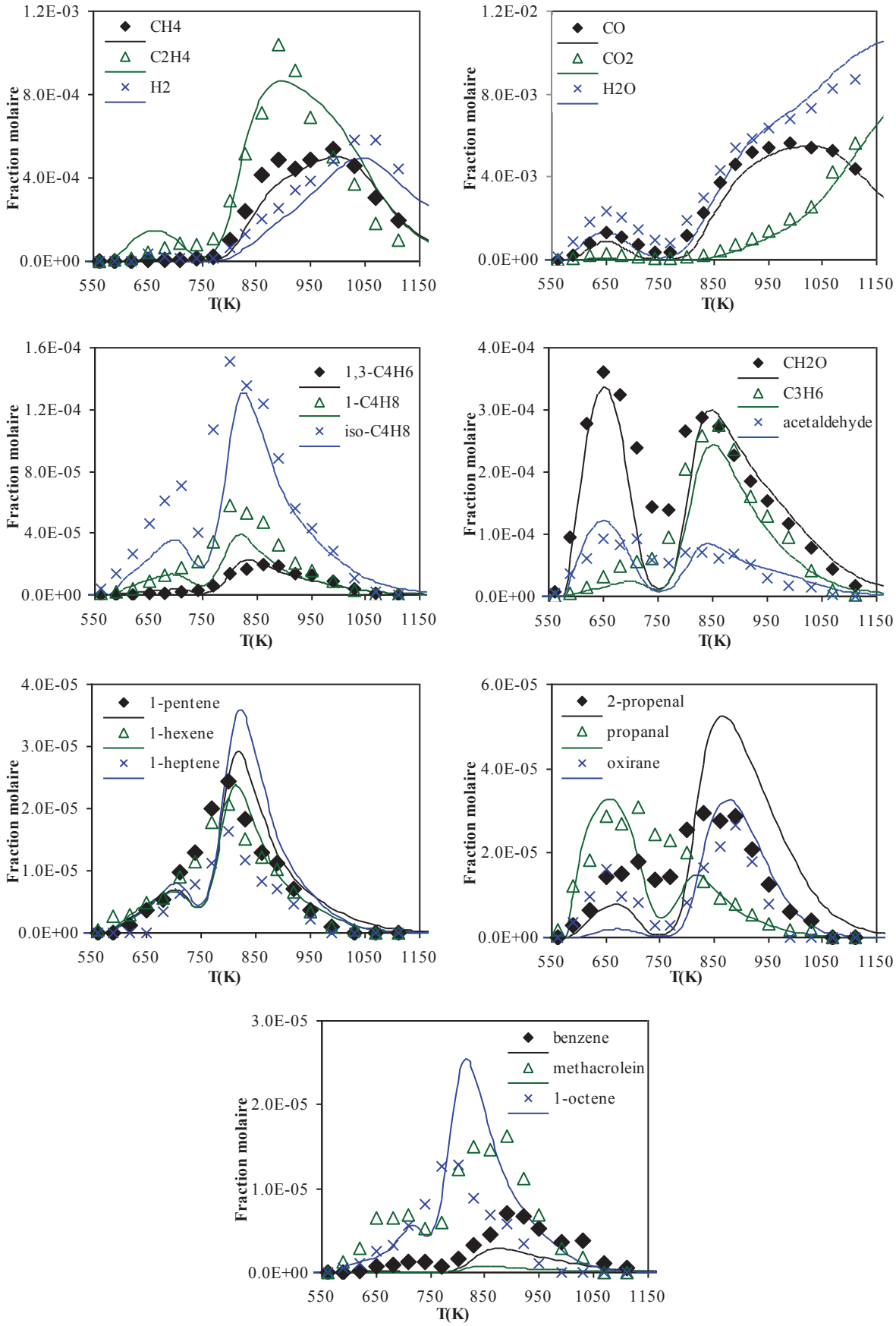


Figure VII.1 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du modèle #0 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1130%

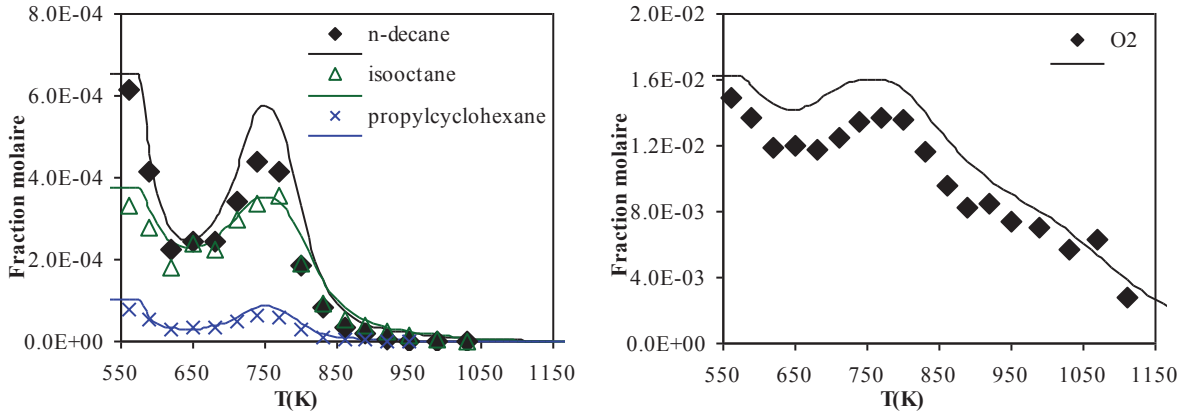


Figure VII.2 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation des réactifs du modèle #0 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1130%

Les résultats présentés sur les figures VII.1 et VII.2 montrent que le modèle reproduit décemment les profils expérimentaux des espèces majoritaires telles que l'eau, le monoxyde de carbone et le dioxyde de carbone. Le modèle reproduit correctement l'oxydation de la plupart des composés dans la flamme froide. Le coefficient négatif de température est convenablement reproduit par le modèle, bien que légèrement surestimé comme ont peut le voir sur les profils de plusieurs espèces intermédiaires. Le modèle reproduit aussi correctement la cinétique d'oxydation de haute température du mélange.

En revanche, on peut voir que le modèle surestime d'un facteur deux la formation de hep-1-ène et de oct-1-ène à haute température. On remarque également que celui-ci sous-estime d'environ 50 % la formation de propèn-2-al (acroléine) à basse température, mais la surestime de 30% à haute température. Le modèle sous-estime (80%) la formation d'oxirane à basse température. Enfin, on remarque que le modèle ne prévoit pas la formation de 2-méthylpropèn-2-al (méthacroléine) bien que nous ayons pu en mesurer une quantité non négligeable (<15 ppm) lors des expériences.

Les profils de consommation des réactifs sont assez bien modélisés, hormis dans la zone de coefficient négatif de température où on constate une surestimation de ce phénomène, c.à.d. que la chute de réactivité est surestimée par le modèle.

7.1.1.2 *Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #1*

Dans ce deuxième mélange nous avons remplacé le n-propylcyclohexane par de la décaline afin de se rapprocher de la composition du GtL, dans laquelle la majeure partie des naphtènes présents sont des di-naphtènes. Les concentrations massiques de ce mélange modèle sont donc : 62,4% de n-décane, 28,8% d'iso-octane et 8,8% de n-propylcyclohexane. L'oxydation de ce mélange a été modélisée à l'aide du mécanisme cinétique détaillé développé ici (chapitre IV). Des conditions initiales identiques à celle des expériences ont été utilisées dans les modélisations. Les fractions molaires de chacun des constituants sont également identiques et sont répertoriées dans le tableau VII.2. Les profils de concentration des réactifs, produits et intermédiaires stables issus des expériences et des simulations sont présentés sur les figures VII.3 et VII.4.

Tableau VII.2 : Conditions initiales et composition du modèle #1 (mélange expérimental et modélisation) utilisées pour la confrontation expérience-modèle du GtL.

$X_{n\text{-décane}}$	0,000650 %	0,001120 %
$X_{iso\text{-octane}}$	0,000375 %	
$X_{décaline}$	0,000095 %	
X_{O2}	0,016139 %	
X_{N2}	0,982741 %	
Caractéristiques	$C_{9,24}H_{20,31}$; H/C : 2,20 ; CN : 54,6	
Conditions initiales	$\varphi = 1$; $\tau = 0,7$ s ; P = 10 atm ; $560 \leq T\ (K) \leq 1110$	

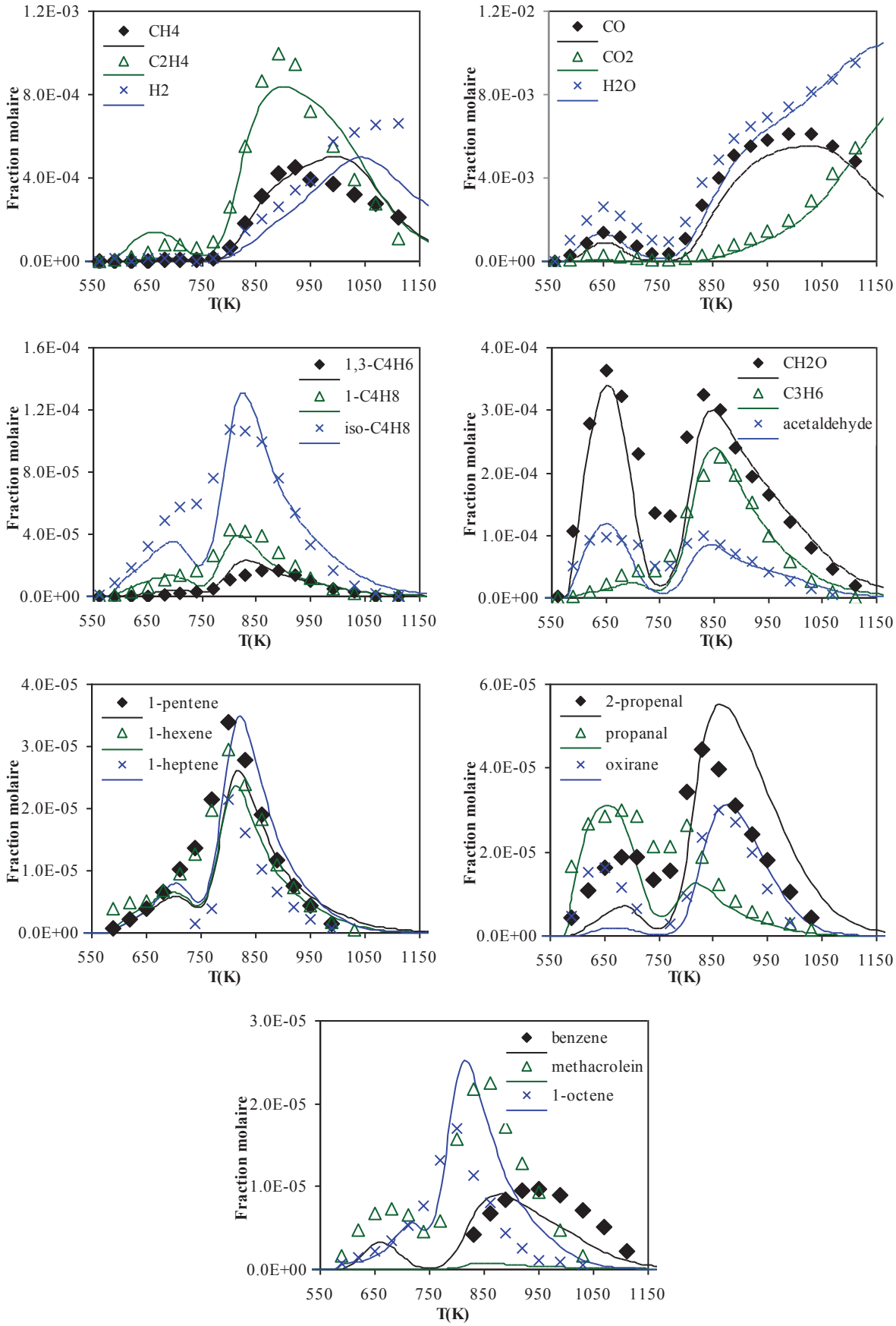


Figure VII.3 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du modèle #1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1120%

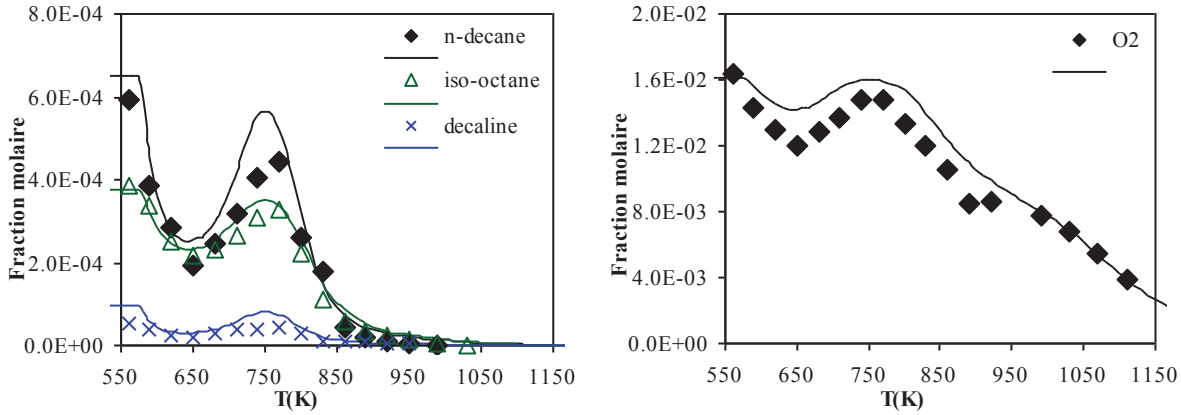


Figure VII.4 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation des réactifs du modèle #1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1120%

On peut voir sur les figures VII.3 et VII.4 que le modèle reproduit convenablement les profils expérimentaux des espèces majoritaires comme l'eau, le monoxyde de carbone et le dioxyde de carbone. Des tendances similaires à celles observées avec le modèle #0 (Figures VII.1 et VII.2) sont visibles sur les profils. En effet, on peut voir que la flamme froide est bien reproduite par le modèle pour la majeure partie des espèces. De même, le modèle reproduit raisonnablement le coefficient négatif de température, bien qu'il soit encore sensiblement surestimé pour quelques espèces. La cinétique d'oxydation de haute température du mélange est aussi bien reproduite par le modèle.

On constate cependant que le modèle surestime encore la formation de hep-1-ène et de oct-1-ène à haute température. On peut voir aussi que celui-ci sous-estime la production de propèn-2-al (acroléine) à basse température et la surestime à haute température. La formation d'oxirane à basse température est largement sous-estimée. On constate enfin que la formation de 2-méthylpropèn-2-al (méthacroléine) n'est pas représentée par le modèle, surtout à haute température.

Enfin, la figure VII.4 montre que les profils de consommation des réactifs sont assez bien reproduits. Cependant, comme pour le modèle #0, on peut voir que le coefficient négatif de température est légèrement surestimé dans cette zone.

7.1.2 Oxydation des mélanges modèles du CtL

Les résultats de l'oxydation des trois mélanges (modèle #0, #1 et #2) obtenus expérimentalement et par modélisation sont présentés dans cette section.

7.1.2.1 *Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #0*

Le premier carburant modèle, appelé modèle #0, a été développé dans une précédente étude [2] sur ce même kérosène de synthèse mais n'avait jamais été oxydé expérimentalement. Dans le chapitre précédent nous avons décris les résultats expérimentaux obtenus avec ce carburant modèle. Il s'agit maintenant de comparer les résultats expérimentaux à ceux issus de la modélisation grâce au mécanisme développé au cours de cette étude. Pour représenter la majeure partie des familles chimiques présentes dans le CtL, le modèle #0 est composé (en %massiques) de 43,1% de n-décane, 11,4% d'iso-octane, 36,1% de n-propylcyclohexane et de 9,4% de n-propylbenzène. Les conditions initiales et les fractions molaires de chacun des constituants du carburant modèle sont répertoriées dans le tableau VII.3. La confrontation entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par modélisation sont présentés sur les figures VII.5 et VII.6.

Tableau VII.3 : Conditions initiales et composition du modèle #0 (mélange expérimental et modélisation) utilisées pour la confrontation expérience-modèle du CtL.

$X_{n\text{-décane}}$	0,000472 %	0,001194 %
$X_{iso\text{-octane}}$	0,000155 %	
$X_{n\text{-propylcyclohexane}}$	0,000445 %	
$X_{n\text{-propylbenzene}}$	0,000122 %	
X_{O2}	0,016731 %	
X_{N2}	0,982075 %	
Caractéristiques	$C_{9,27}H_{18,97}$; H/C : 2,04 ; CN : 52,9	
Conditions initiales	$\varphi = 1$; $\tau = 0,7$ s ; P = 10 atm ; $560 \leq T\,(K) \leq 1110$	

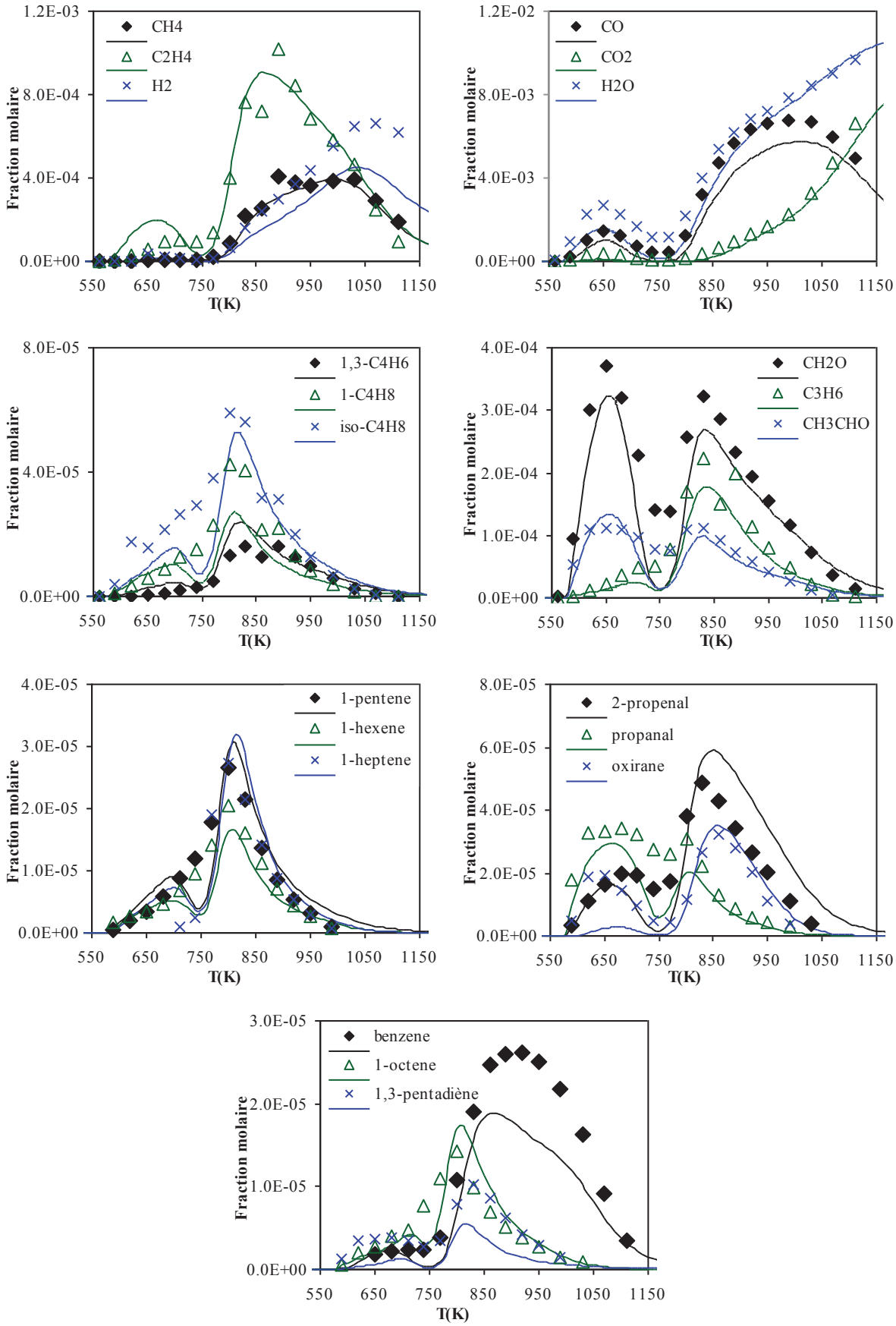


Figure VII.5 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du modèle #0 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1194%

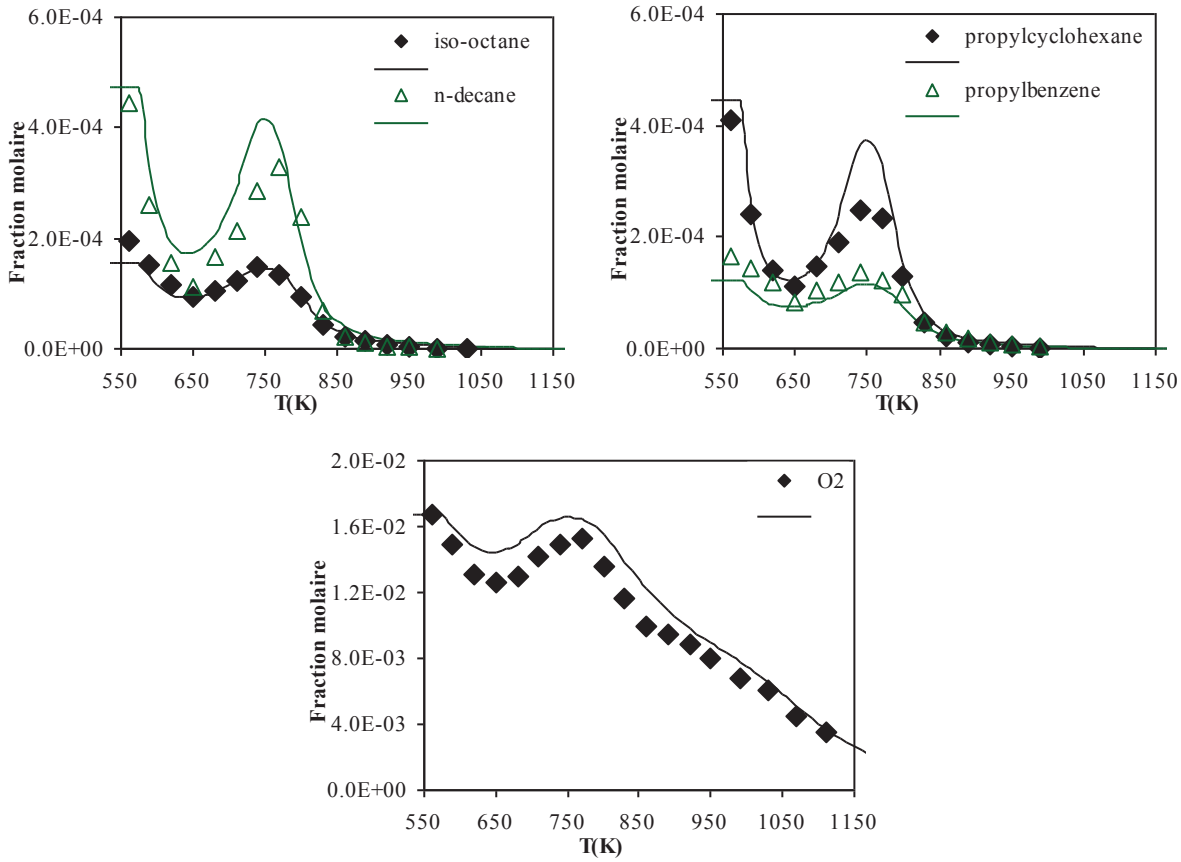


Figure VII.6 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation des réactifs du modèle #0 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1194%

Les figures VII.5 et VII.6 présentent les résultats obtenus de la confrontation expérience-modèle du mélange modèle #0. Ceux-ci indiquent que la simulation représente correctement les profils des espèces majoritaires telles que l'eau, le monoxyde de carbone et le dioxyde de carbone. Le modèle reproduit correctement l'oxydation de la plupart des composés dans la flamme froide et à haute température mais surestime légèrement le coefficient négatif de température, comme on peut le voir sur les profils de quelques espèces.

On remarque que le modèle sous-estime d'un facteur deux la formation de but-1-ène à haute température, ce qui n'était pas le cas pour les modèles du GtL. On remarque également que celui-ci surestime sensiblement la formation de propèn-2-al à haute température et sous-estime celle de benzène.

Les profils de consommation des réactifs sont correctement reproduits pour l'iso-octane et le n-propylbenzène. Cependant, on peut voir que dans la zone de coefficient négatif

de température on observe une surestimation de la concentration du n-décane et du n-propylcyclohexane. La consommation du dioxygène est bien reproduite.

7.1.2.2 *Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #1*

Dans le second mélange (modèle #1) une partie du n-propylcyclohexane a été remplacée par de la décaline afin de se rapprocher de la composition du CtL. Ce modèle est ainsi composé (en %massiques) de 43,1% de n-décane, 11,4% d'iso-octane, 12,1% de n-propylcyclohexane, 24% de décaline et de 9,4% de n-propylbenzène. Les conditions initiales et les fractions molaires de chacun des constituants du carburant modèle sont répertoriées dans le tableau VII.4. La confrontation entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par modélisation sont présentés sur les figures VII.7 et VII.8. On peut voir que les profils simulés représentent correctement les trois régimes d'oxydation observés au cours de nos expériences.

Tableau VII.4 : Conditions initiales et composition du modèle #1 (mélange expérimental et modélisation) utilisées pour la confrontation expérience-modèle du CtL.

$X_{n\text{-décane}}$	0,000470 %	0,001164 %
$X_{iso\text{-octane}}$	0,000155 %	
$X_{n\text{-propylcyclohexane}}$	0,000148 %	
$X_{décaline}$	0,000269	
$X_{n\text{-propylbenzene}}$	0,000122 %	
X_{O2}	0,016584 %	
X_{N2}	0,982252 %	
Caractéristiques	$C_{9,5}H_{18,99}$; H/C : 1,99 ; CN : 52	
Conditions initiales	$\varphi = 1$; $\tau = 0,7$ s ; P = 10 atm ; $560 \leq T\,(K) \leq 1110$	

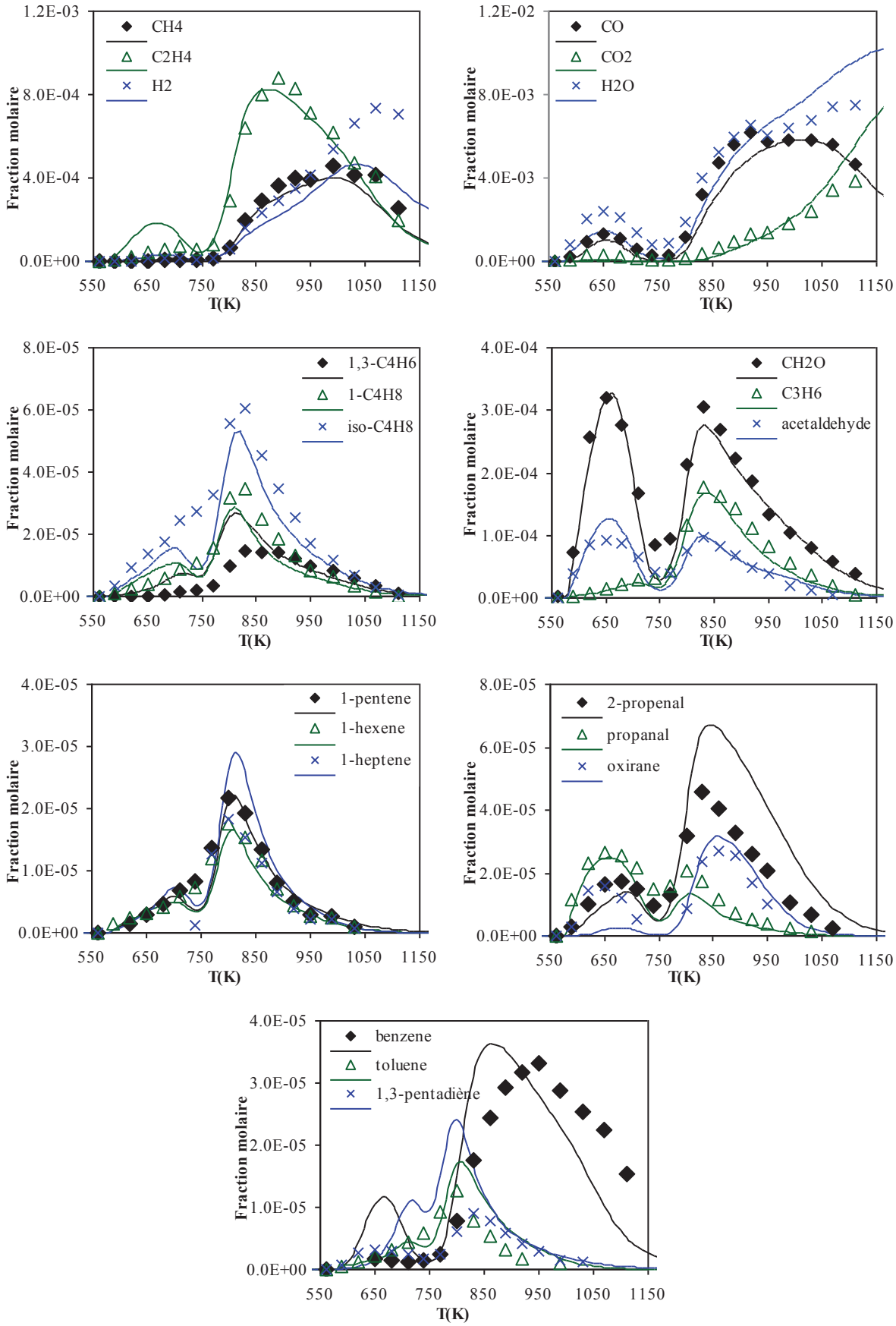


Figure VII.7 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du modèle #1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1164%

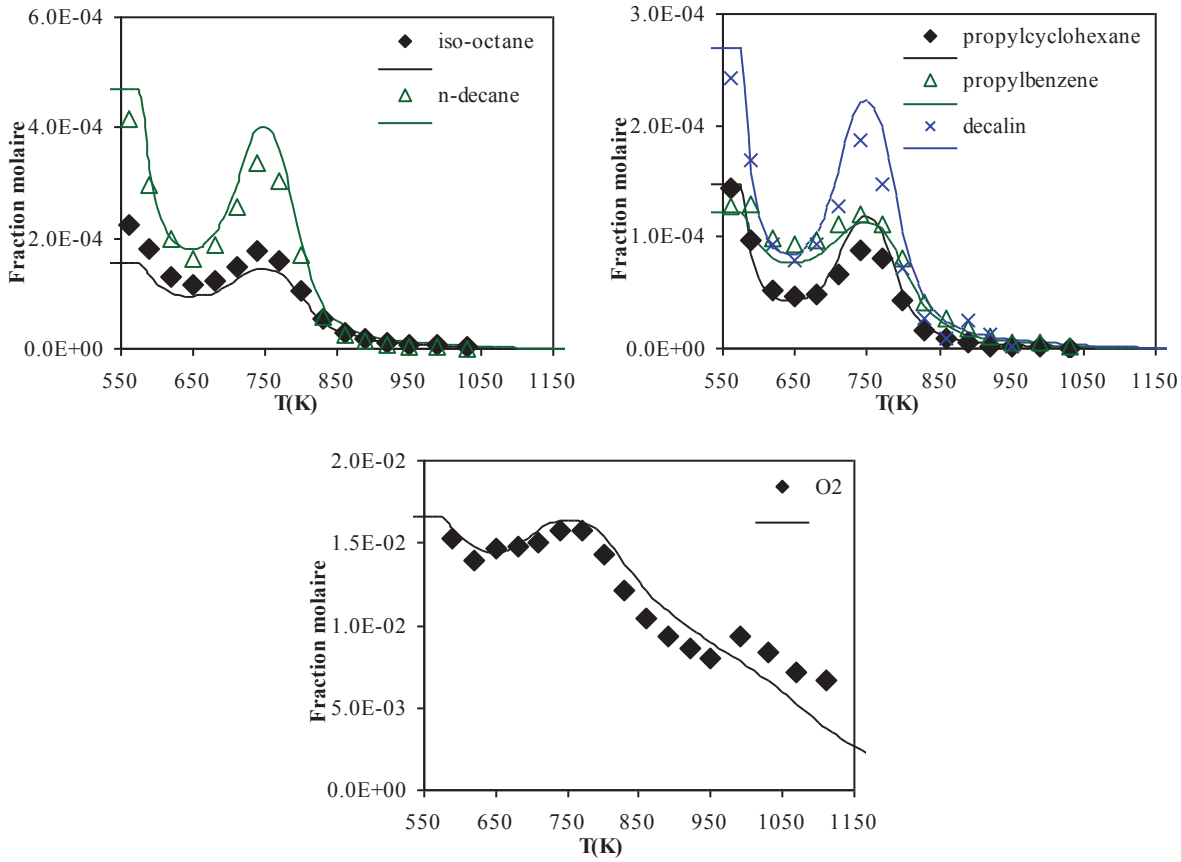


Figure VII.8 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation des réactifs du modèle #1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1164%

De même que pour le modèle #0, les figures VII.7 et VII.8 présentent les résultats obtenus de la confrontation expérience-modèle du mélange modèle #1. On peut voir sur ces figures que les résultats de la modélisation reproduisent relativement bien les profils de la plupart des espèces à basse et à haute température. Le coefficient négatif de température de quelques espèces est en revanche surestimé par le modèle.

On remarque que le modèle surestime la formation de propèn-2-al à haute température, ainsi que celle de penta-1,3-diène à basse et haute température. On constate également que le modèle sous-estime largement la formation d'oxirane à basse température.

Sur la figure VII.8, on peut voir que les profils de consommation des réactifs sont correctement reproduits pour l'iso-octane, le n-propylbenzène et le n-propylcyclohexane. Sur le profil de n-décane et de décaline on observe cependant une sous-estimation de leur

consommation dans le coefficient négatif de température. Le profil de consommation de l'oxygène est bien reproduit.

7.1.2.3 *Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du mélange modèle #2*

Dans le troisième et dernier mélange (modèle #2), nous avons modifié la fraction de chacun des composés afin de se rapprocher de la composition réelle du CtL, et ainsi de mieux reproduire la réactivité de ce dernier (voir chapitre VI). Ce modèle est ainsi composé (en %massiques) de 15% de n-décane, 27% d'iso-octane, 16,1% de n-propylcyclohexane, 28,3% de décaline et de 13,6% de n-propylbenzène. Le tableau VII.5 expose les conditions initiales et les fractions molaires de chacun des constituants du modèle utilisées pour la modélisation. Les figures VII.9 et VII.10 présentent la confrontation entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par modélisation. On peut voir que les trois régimes d'oxydation observés au cours de nos expériences sont correctement reproduits par les profils simulés.

Tableau VII.5 : Conditions initiales et composition du modèle #2 (mélange expérimental et modélisation) utilisées pour la confrontation expérience-modèle du CtL.

$X_{n\text{-décane}}$	0,000163 %	0,001217 %
$X_{iso\text{-octane}}$	0,000365 %	
$X_{n\text{-propylcyclohexane}}$	0,000197 %	
$X_{décaline}$	0,000317 %	
$X_{n\text{-propylbenzene}}$	0,000175 %	
X_{O2}	0,016439 %	
X_{N2}	0,982344 %	
Caractéristiques	$C_{9,09}H_{17,67}$; H/C : 1,94 ; CN : 36,2	
Conditions initiales	$\varphi = 1$; $\tau = 0,7$ s ; P = 10 atm ; $560 \leq T\,(K) \leq 1110$	

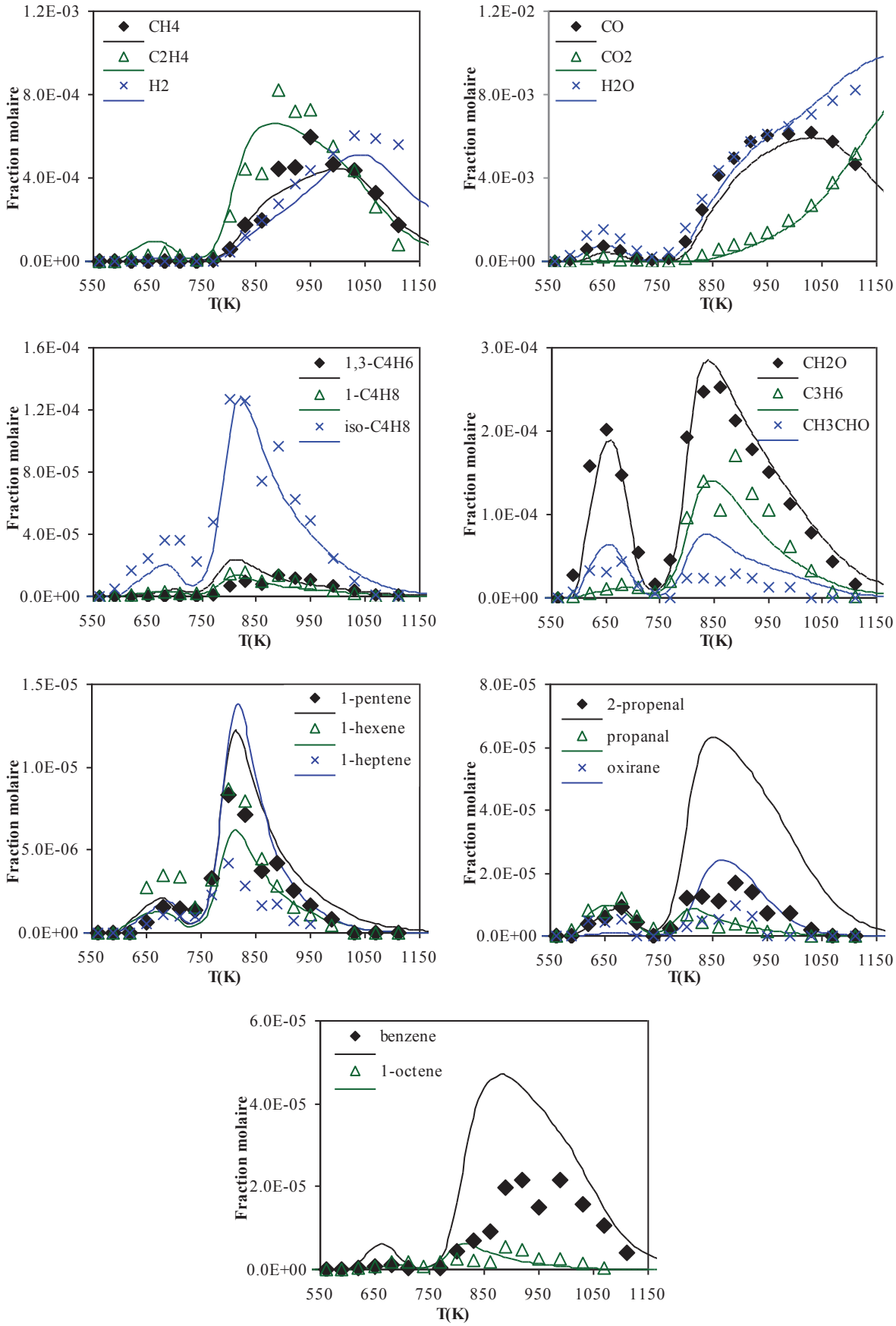


Figure VII.9 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du modèle #2 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1217%

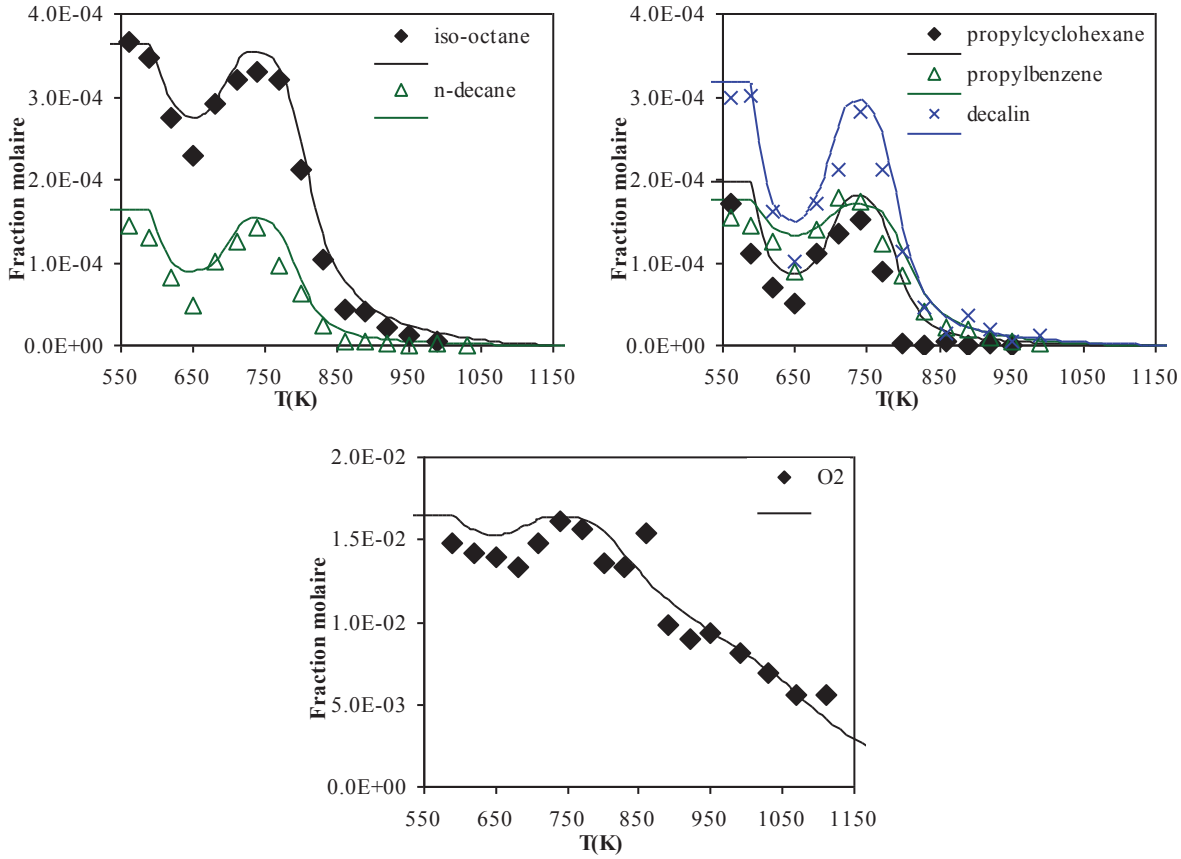


Figure VII.10 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation des réactifs du modèle #2 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1217%

Les figures VII.9 et VII.10 présentent les résultats obtenus par confrontation expérience-modèle lors de l'oxydation du mélange modèle #2. Ces résultats montrent que le modèle reproduit convenablement les profils de concentration de la plupart des espèces à basse et à haute température. On peut en effet voir que la forte production d'isobutène par ce mélange est bien reproduite par le modèle.

Cependant on peut noter quelques écarts sur les profils de certaines espèces minoritaires. En effet, on constate que le modèle surestime très fortement la formation de propèn-2-al, de benzène et de hept-1-ène à haute température. On remarque également que celui-ci sous-estime la formation d'oxirane à basse température et la surestime à haute température.

On peut voir sur la figure VII.10 que les profils de consommation des réactifs sont assez bien reproduits pour l'iso-octane, le n-propylbenzène et le n-propylcyclohexane. En

revanche, le modèle sous-estime la consommation du n-décane et de la décaline. La consommation de l'oxygène est bien reproduite.

7.1.3 Conclusion sur la validation du modèle en mélange de composés purs

La confrontation entre les données expérimentales obtenues lors de l'oxydation des différents mélanges d'hydrocarbures avec les résultats de simulation de l'oxydation de ces mêmes mélanges a permis de valider le modèle cinétique. Celui-ci pourra être utilisé pour la modélisation de carburants de synthèse, ce qui sera présenté dans le paragraphe suivant.

7.2 Modélisation cinétique de l'oxydation de kérosènes de synthèse

L'un des principaux objectifs de cette étude a été le développement de modèles réactionnels de cinétique chimique détaillés, capables de décrire la combustion de kérosènes de synthèse de type XtL (kérosènes F-T), dans une large gamme de conditions. Ces modèles ont été développés d'après des études précédentes effectuées sur ces mêmes kérosènes, ainsi que sur l'étude de plusieurs composés purs pouvant représenter chacune des familles d'espèces composants ces kérosènes. La composition des carburants-modèles retenus pour représenter l'oxydation des trois kérosènes de synthèse étudiés est décrite dans le chapitre IV. Le mécanisme a été validé face aux données expérimentales obtenues pour chacun des composés purs, ainsi que via l'étude de l'oxydation de mélanges d'hydrocarbures dans diverses conditions.

Grâce à nos nouveaux carburant-modèles, nous avons simulé l'oxydation de chacun des kérosènes de synthèse étudiés. Ces confrontations expérience-modélisation sont présentées ci-après.

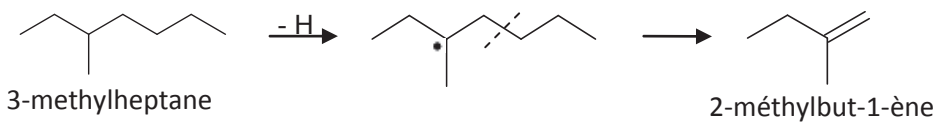
7.2.1 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse SPK

Le carburant-modèle développé pour représenter l'oxydation du kérosène synthétique paraffinique de l'IFPEN a été défini sur la base des travaux de Mzé-Ahmed *et al.* [3]. Il est ainsi composé (en %massiques) de 19,5% de n-décane, 10% d'iso-octane, 20% de 2-méthylheptane, 50% de 3-méthylheptane et 0,5% de n-propylbenzène.

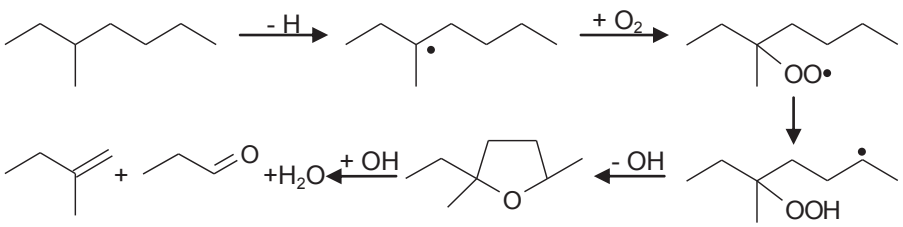
Les profils de concentrations expérimentaux et simulés des principales espèces issues de l'oxydation du SPK, à trois richesses de mélange (0,5, 1 et 2), sont présentés respectivement sur les figures VII.11, VII.12 et VII.13. On peut voir sur ces figures que le modèle développé reproduit correctement les profils des principales espèces issues de l'oxydation du SPK. En effet, on constate que le modèle simule bien le CO, le CO_2, l'eau, le formaldéhyde, le propène et l'acétaldéhyde aux trois richesses de mélange. On peut voir aussi que la formation d'isobutène est bien reproduite dans ces trois conditions.

Cependant celui-ci surestime les quantités de but-1-ène et de 2-méthylbut-1-ène aux trois richesses. Ces deux espèces proviennent directement de la décomposition du 3-méthylheptane, présent en grande quantité dans notre carburant-modèle. Ci-dessous est illustrée cette décomposition en 2-méthylbut-1-ène à haute température par β-scission et à basse température par formation puis décomposition de l'éther cyclique majoritaire.

- *Haute température :*



- *Basse température :*



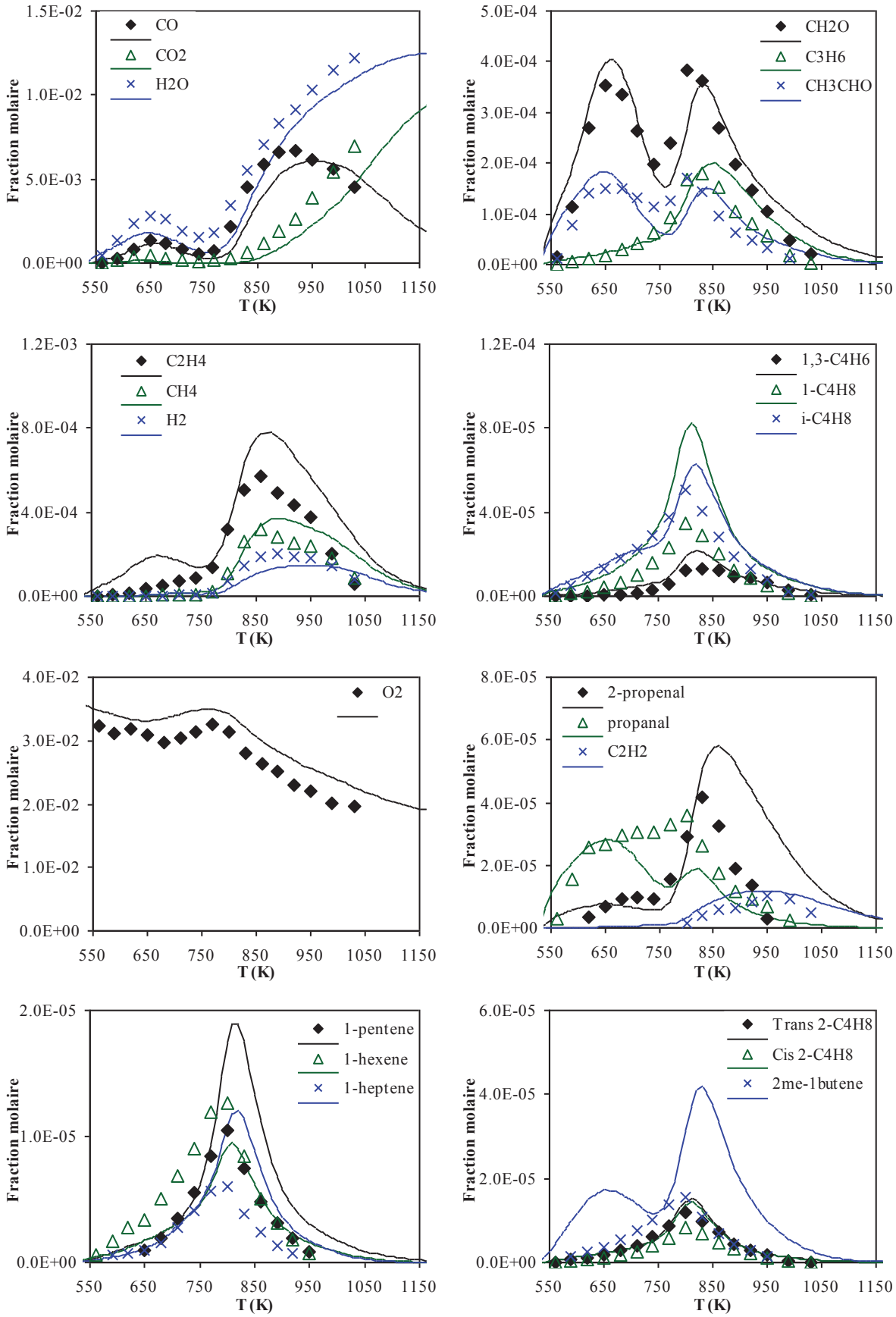


Figure VII.11 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du SPK en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,52% ; X_{N2}=96,38% ; carburant-modèle : $X_{modèle}$=0,1380% ; X_{O2}=3,585% ; X_{N2}=96,327%

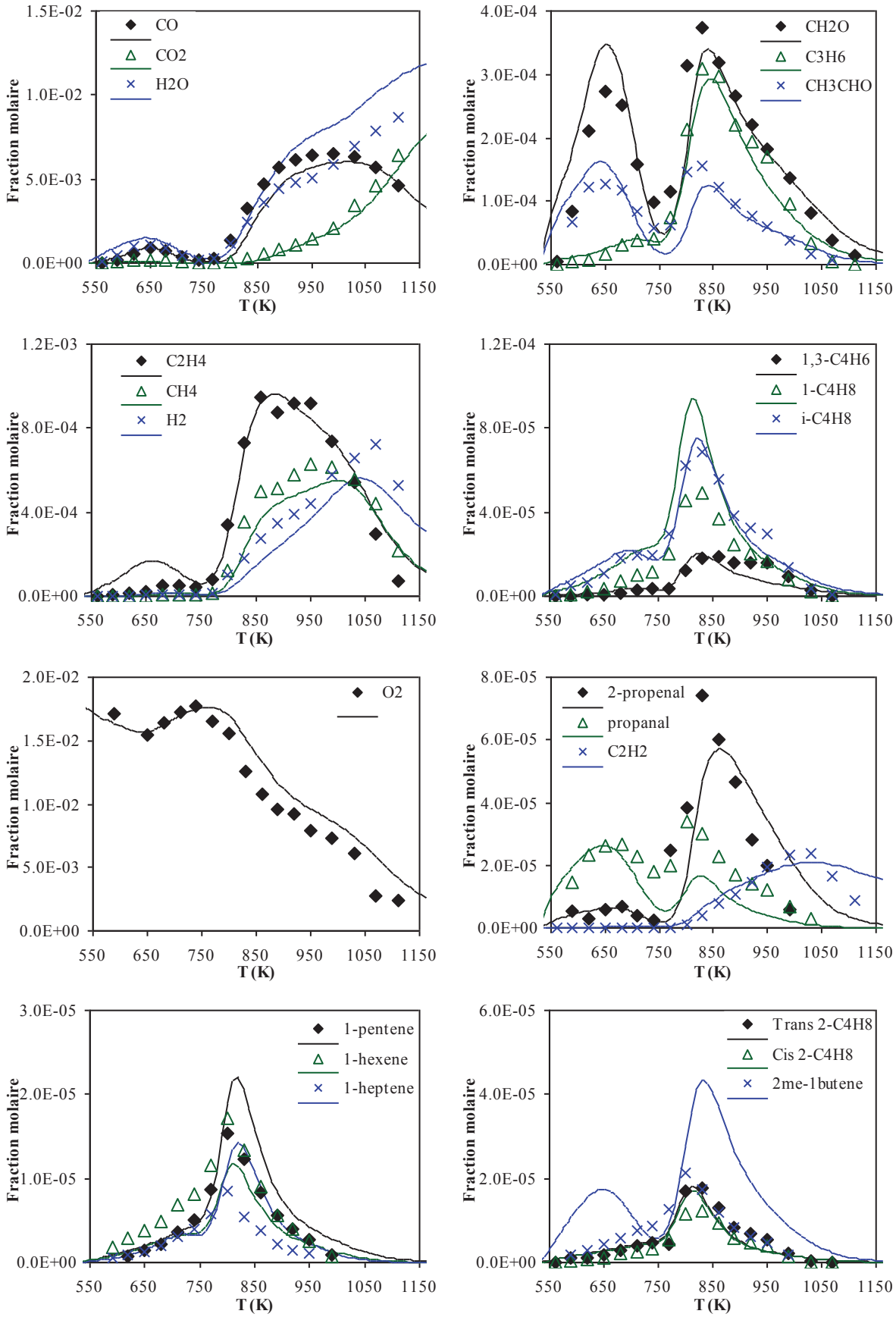


Figure VII.12 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du SPK en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,76% ; X_{N2}=98,14% ; carburant-modèle : $X_{modèle}$=0,1380% ; X_{O2}=1,793% ; X_{N2}=98,069%

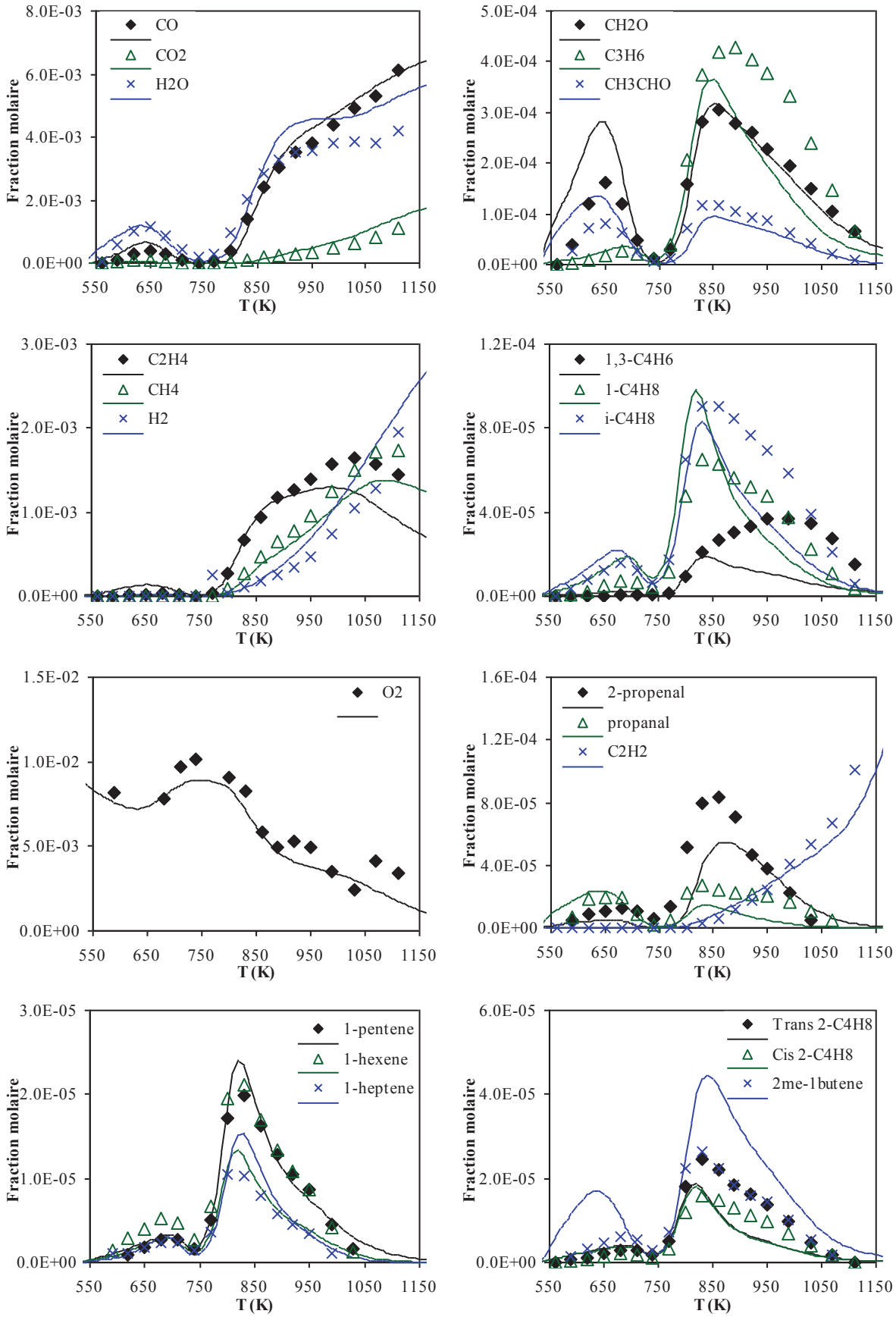


Figure VII.13 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du SPK en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,88% ; X_{N2}=99,02% ; carburant-modèle : $X_{modèle}$=0,1380% ; X_{O2}=0,896% ; X_{N2}=98,966%

On peut voir aussi qu'en milieu pauvre l'éthylène et le pent-1-ène sont légèrement surestimés, ce qui n'est pas le cas aux deux autres richesses. On remarque aussi qu'en milieu pauvre le modèle sous-estime la formation de formaldéhyde à basse température ainsi que celle de propène et de buta-1,3-diène à haute température. Le propèn-2-al est surestimé en milieu pauvre, bien représenté à la stoechiométrie et sous-estimé en milieu riche. La consommation de l'oxygène est bien reproduite.

Enfin, l'amplification du coefficient négatif de température (plus prononcé) avec l'augmentation de la richesse observé au cours des expériences est bien reproduite par le modèle. Les profils des réactifs ne sont pas comparés en raison de la composition complexe de ce kérosène synthétique. En effet, le nombre très important de molécules présentes initialement dans ce genre de carburant rend cette comparaison impossible.

Afin de confirmer la validité de ce nouveau carburant-modèle, nous avons comparé les résultats obtenus par modélisation avec l'ancien modèle composé (en %massiques) de 54,2% de n-décane, de 45,3% d'iso-octane et de 0,5% de n-propylbenzène, avec ceux obtenus grâce à notre nouveau modèle présenté au chapitre IV). La figure VII.14 présente la comparaison entre ces deux modèles et les résultats expérimentaux obtenus lors de l'oxydation du SPK.

Sur la figure VII.14, on remarque que l'effet essentiel de l'utilisation de ce nouveau carburant-modèle sur les principaux intermédiaires et produits de combustion est la baisse évidente de la formation d'isobutène. On peut voir aussi une légère hausse de la réactivité ainsi qu'une diminution de l'importance du coefficient négatif de température. Ce nouveau modèle entraîne aussi une hausse de la quantité d'acétaldéhyde dans tout le domaine de température, ce qui représente une amélioration. Enfin, on constate une légère augmentation de la production d'éthylène ce qui représente aussi une amélioration de la simulation à haute température. Toutefois le modèle surestime la concentration d'éthylène à basse température.

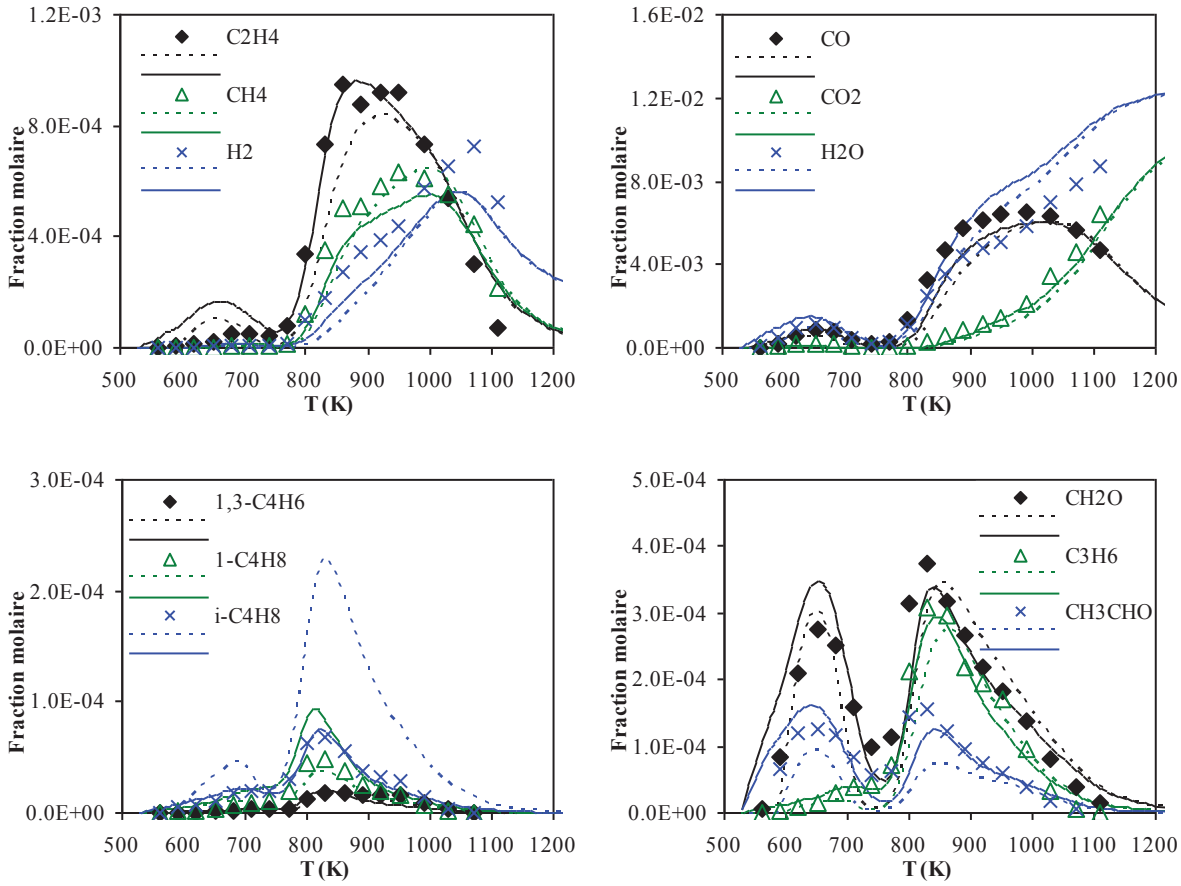


Figure VII.14 : Confrontation expérience (symboles)-ancien modèle (pointillés)-nouveau modèle (traits pleins) pour l'oxydation du SPK en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{CtL}=0,1% ; $X_{ancien\ modèle}$=0,1281% ; $X_{nouveau\ modèle}$=0,1380%

L'isobutène (iC_4H_8) est l'espèce spécifique majoritaire de l'oxydation des iso-paraffines. On peut voir sur la figure VII.15 une analyse des voies réactionnelles obtenue avec le nouveau carburant-modèle constitué de trois iso-paraffines pour représenter cette famille : l'iso-octane, le 2-méthylheptane et le 3méthylheptane. On remarque sur cette figure que l'isobutène est principalement formée à partir de l'iso-octane et du 2-méthylheptane. Or on a pu voir que le ce modèle est constitué d'une très faible fraction d'iso-octane. Une faible partie provient aussi du 3-méthylheptane, mais est négligeable devant les autres flux. Cela illustre la difficulté pour trouver des molécules modèles idéales pour représenter chacune des familles chimiques présentes dans un carburant complexe.

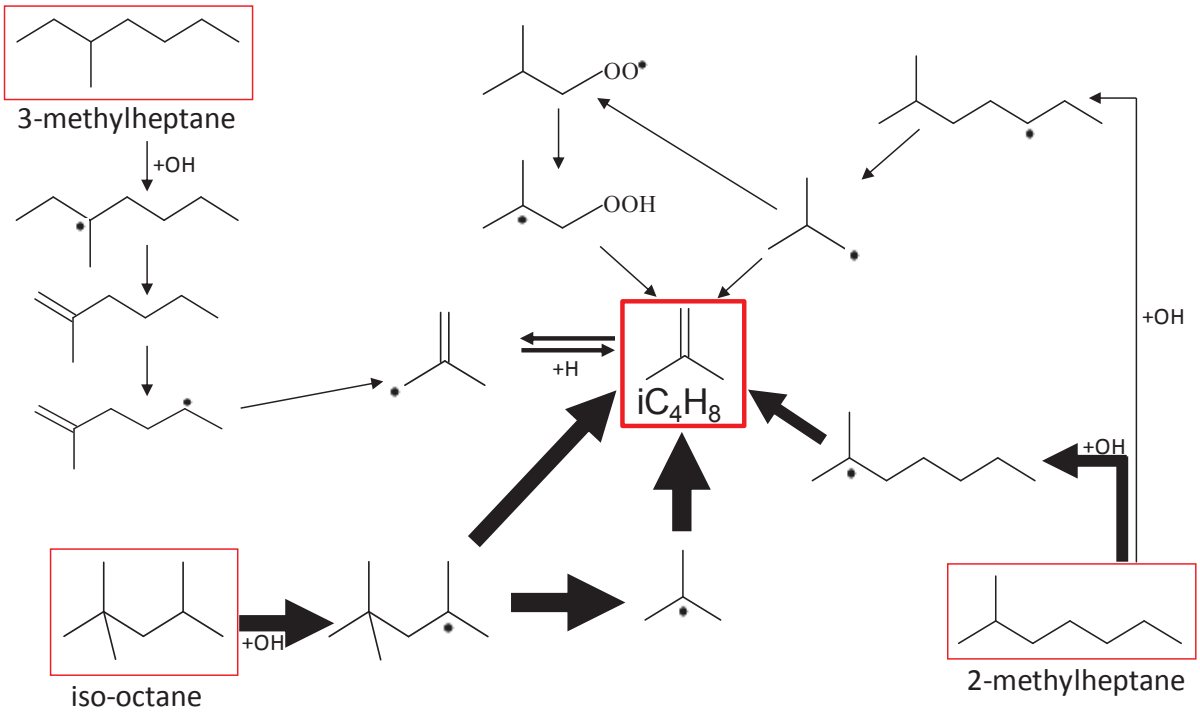


Figure VII.15 : Analyse des flux réactionnels pour la formation de l'isobutène avec le nouveau modèle à cinq constituants du SPK à $\varphi = 1$; $\tau = 0.7$ s et à 830 K

Afin de déterminer les voies réactionnelles des carburants les plus influentes pour la formation des espèces principales et produits de combustion, des études de sensibilité ont été menées pour plusieurs espèces, aux températures correspondant à leur maximum de formation. Ces analyses ont permis de déterminer la dépendance des résultats vis-à-vis des paramètres cinétiques du modèle. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure VII.16. Les réactions ayant un coefficient de sensibilité positif favorisent la formation de l'espèce. En revanche, un coefficient de sensibilité négatif induit une diminution de la concentration de l'espèce lorsque la constante de vitesse de cette réaction augmente. On peut y voir les analyses de sensibilité du radical OH au maximum de la flamme froide (650 K), du CO_2 à 1030 K lorsque qu'il ne reste quasiment que les produits de fin de combustion, de l'éthylène, du propène et de l'isobutène à leur maximum de formation à haute température (830 K).

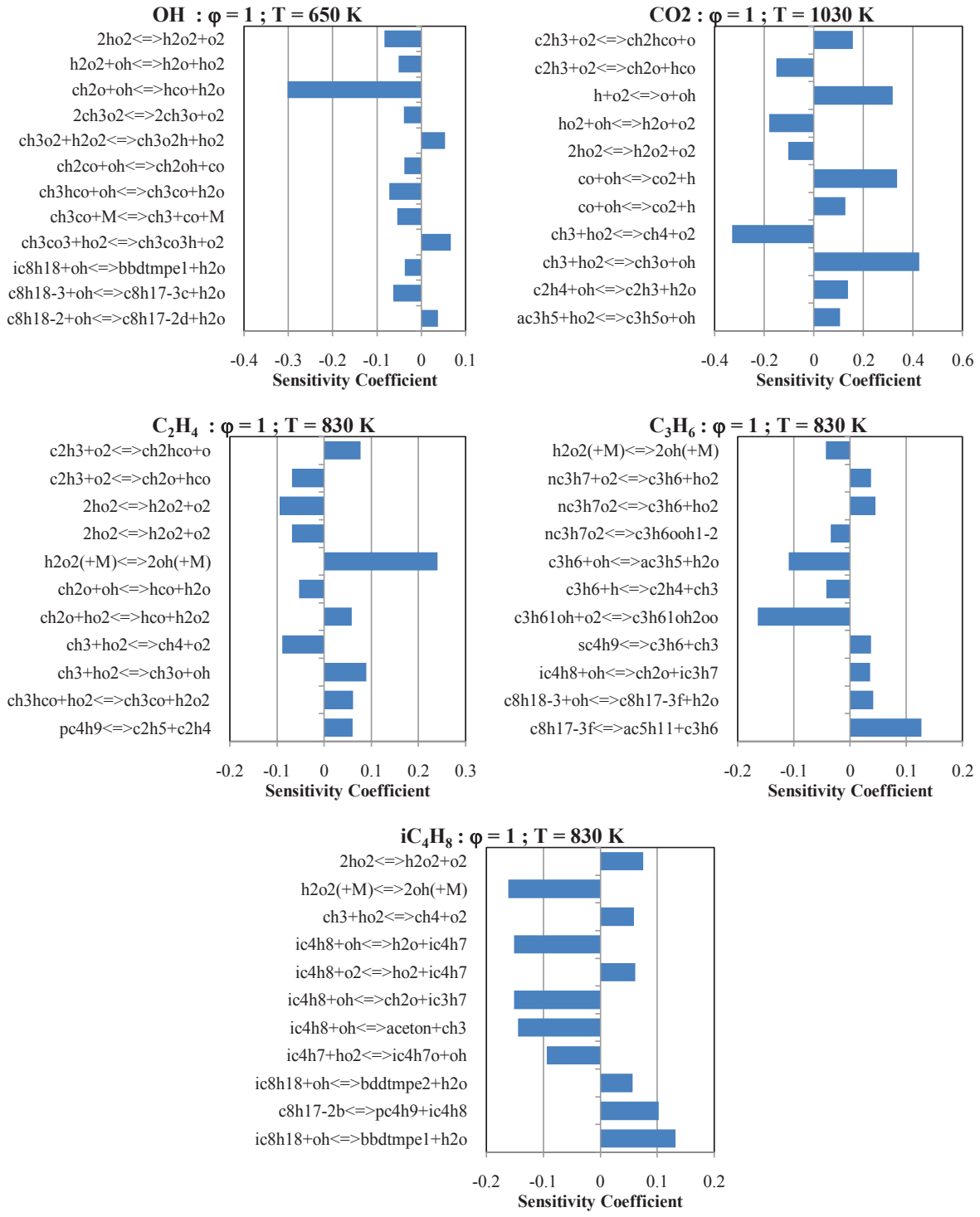


Figure VII.16 : Analyses de sensibilité relatives à la formation de OH à 650 K, CO_2 à 1030 K, C_2H_4, C_3H_6 et iC_4H_8 à 830 K lors de l'oxydation du modèle du SPK en réacteur auto-agité (φ=1, 10 atm, τ=0.7 s)

Pour le radical OH, on remarque que le modèle est principalement sensible à la réaction de métathèse du formaldéhyde avec OH, jouant un rôle très important sur la consommation de ce radical. Les coefficients de sensibilité associés aux réactions des carburants sont très faibles, ce qui signifie que le modèle n'est pas très sensible à leurs

cinétiques. On peut le vérifier sur l'analyse du CO_2 à haute température dans laquelle on constate que le modèle n'est sensible qu'à des réactions impliquant des petites espèces. Les analyses de sensibilité pour C_2H_4, C_3H_6 et iC_4H_8 indiquent sensiblement la même chose. On remarque tout de même une réaction sensible à la formation du propène correspondant à une β-scission d'un radical primaire du 3-méthylheptane. L'analyse de sensibilité pour l'isobutène indique trois réactions favorisant la formation de cette espèce : deux correspondent à des métathèses de l'iso-octane avec OH et la dernière à une β-scission d'un radical primaire du 2-méthylheptane.

Enfin, nous avons déterminé quels hydrocarbures présents initialement dans le carburant-modèle étaient responsables de la réactivité globale du système. Pour cela nous avons décidé de chercher l'origine de la formation des radicaux OH grâce à une analyse des voies réactionnelles. Cette analyse a été effectuée à haute température, au niveau du pic de formation des intermédiaires (830 K). Les résultats obtenus sont présentés dans la figure VII.17.

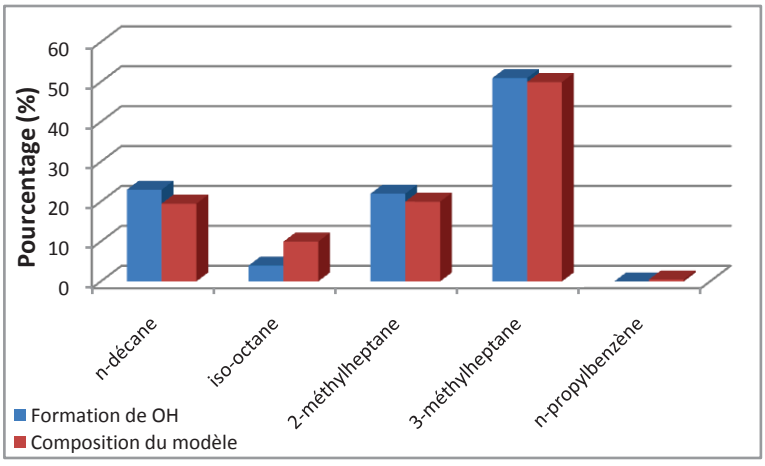


Figure VII.17 : Responsabilité de chaque hydrocarbure du modèle sur la formation des radicaux OH
Analyse des voies réactionnelles à φ=1, 830 K, τ=0.7s, 10 atm

On peut voir que les pourcentages de formation de OH obtenus sont très proches de la composition initiale du modèle et un lien entre le pourcentage de formation des radicaux OH et la réactivité individuelle des hydrocarbures. En effet, on peut voir que le n-décane, qui possède un indice de cétane élevé (~77) par rapport au mélange global (~45), contribue plus à la formation des OH, par rapport à sa concentration dans le carburant-modèle. A l'inverse, on constate que l'iso-octane, qui possède un indice de cétane très bas (~12) [5], induit une faible formation de OH par rapport à sa concentration initiale présente dans le carburant-modèle.

7.2.2 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse GtL

Le carburant-modèle développé pour représenter l'oxydation du kérosène synthétique de type GtL a été défini sur la base des travaux thèse de Mzé-Ahmed [4] et de l'étude de Dagaut *et al.* [1]. Il est ainsi composé (en %massiques) de 28,1% de n-décane, 30% de 2-méthylheptane, 33,1% de 3-méthylheptane et de 8,8% de décaline.

La confrontation des profils de concentration expérimentaux et simulés des principaux intermédiaires stables et produits de combustion, obtenus lors de l'oxydation du GtL à la stœchiométrie, est présentée sur la figure VII.18. En raison de la complexité de ce kérosène synthétique, les profils des réactifs ne sont pas comparés. On peut voir sur cette figure que notre nouveau modèle reproduit correctement l'ensemble des profils d'espèces majoritaires. En effet, l'eau, le CO, le CO_2, le formaldéhyde, le propène et l'acétaldéhyde sont bien simulés sur toute la gamme de température. C'est aussi le cas pour les profils de méthane, d'éthylène et d'hydrogène. La formation d'isobutène est de même bien reproduite, ainsi que celle de but-1-ène et de buta-1,3-diène.

En revanche, on remarque que le modèle surestime légèrement la formation de propèn-2-al et de 2-méthylbut-1-ène à basse et à haute température. On peut voir aussi qu'il sous-estime largement la formation d'oxirane à basse température mais reproduit bien celle à haute température. Le modèle sous-estime légèrement le profil de hex-1-ène sur tout le domaine de température. Les profils de pent-1-ène, d'acétylène et de cis et trans-but-2-ène sont correctement simulés. Enfin, la consommation de l'oxygène est aussi bien reproduite par le modèle.

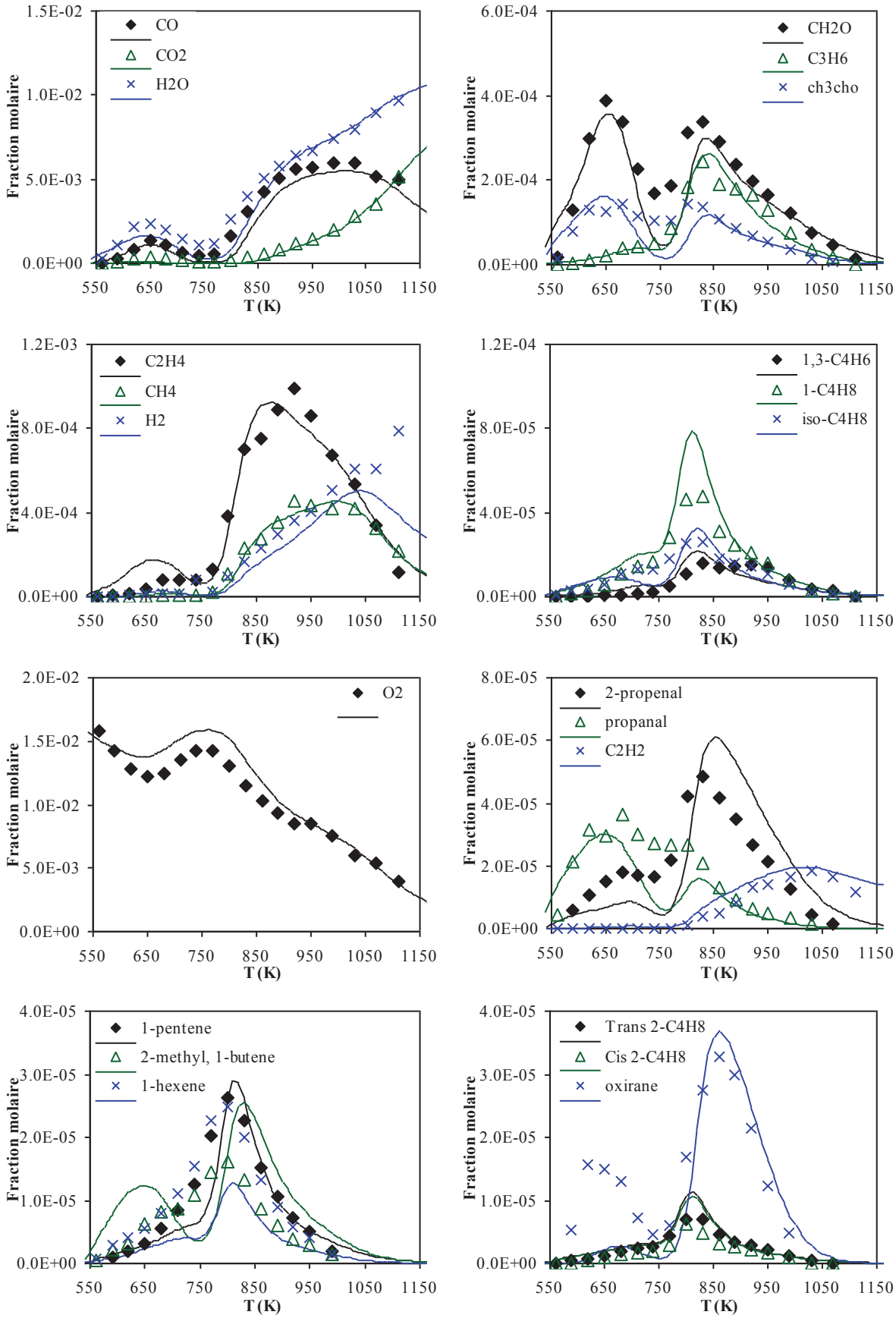


Figure VII.18 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du GtL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,76% ; X_{N2}=98,14% ; carburant-modèle : $X_{modèle}$=0,1209% ; X_{O2}=1,6185% ; X_{N2}=98,2606%

Dans le but confirmer la validité de ce nouveau carburant-modèle, nous avons comparé les résultats de la modélisation obtenus avec l'ancien modèle (concentrations massiques : 62,4% n-décane ; 28,8% iso-octane ; 8,8% n-propylcyclohexane) et ceux obtenus avec notre nouveau modèle présenté au chapitre IV. La figure VII.19 présente la comparaison entre ces deux modèles et les résultats expérimentaux obtenus lors de l'oxydation du GtL.

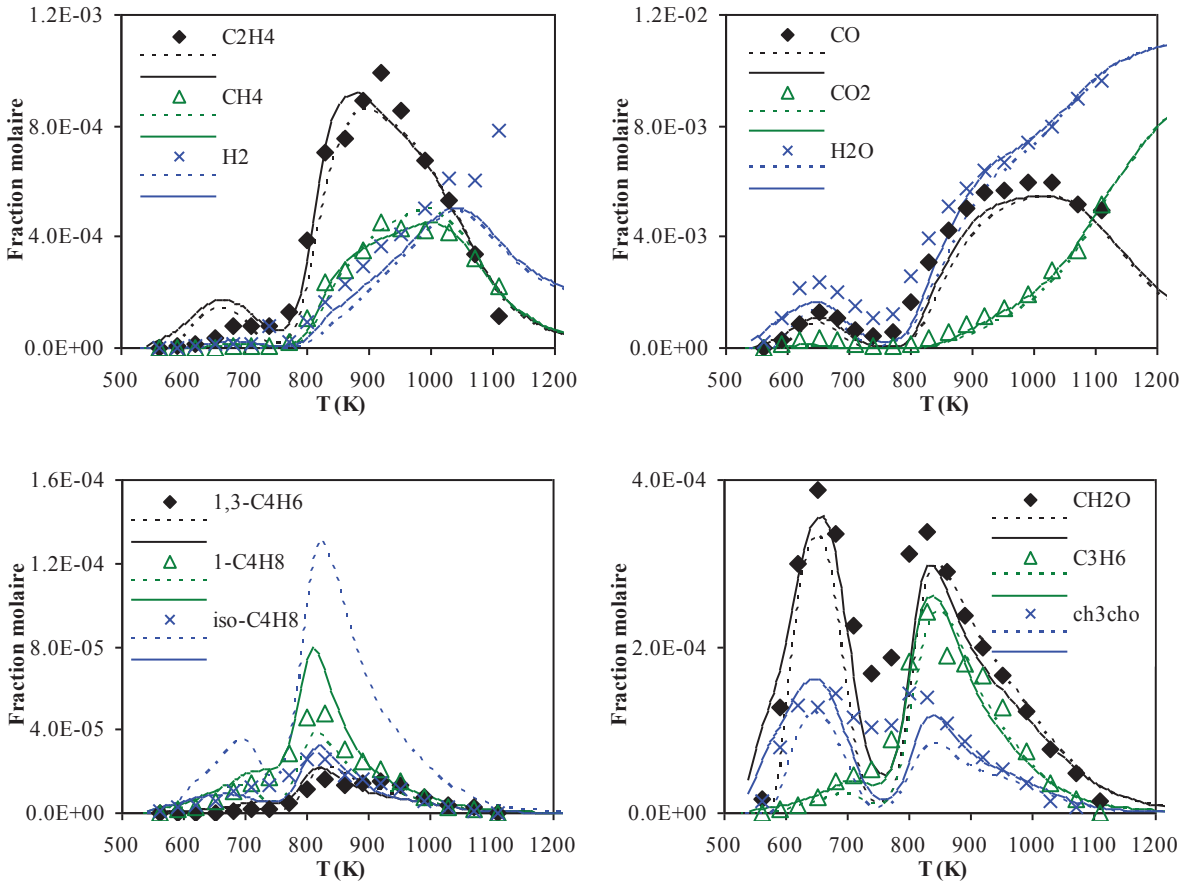


Figure VII.19 : Confrontation expérience (symboles)-ancien modèle (pointillés)-nouveau modèle (traits pleins) pour l'oxydation du GtL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{GtL}=0,1% ; $X_{ancien\ modèle}$=0,1130% ; $X_{nouveau\ modèle}$=0,1209%

Sur la figure VII.19, on constate par comparaison avec l'ancien modèle que le principal effet de l'utilisation de ce nouveau carburant-modèle sur les espèces majoritaires est la baisse significative de la formation d'isobutène, en bon accord avec les expériences. Les autres profils sont sensiblement restés les mêmes, hormis une légère hausse de but-1-ène.

De la même façon que pour le SPK, nous avons voulu savoir comment était formé l'isobutène lors de l'oxydation de notre carburant-modèle, composé seulement de 2-

méthylheptane et de 3-méthylheptane pour représenter les iso-paraffines. Pour cela nous avons effectué une analyse des voies réactionnelles à φ = 1 et à 830 K avec ce nouveau carburant-modèle. Cette analyse est présentée sur la figure VII.20. On peut voir sur cette figure que l'isobutène est uniquement formé par oxydation du 2-méthylheptane dans ce modèle. L'isobutène étant la molécule spécifique majoritaire de la décomposition des iso-paraffines, cela illustre une fois de plus la difficulté de trouver des molécules modèles idéales.

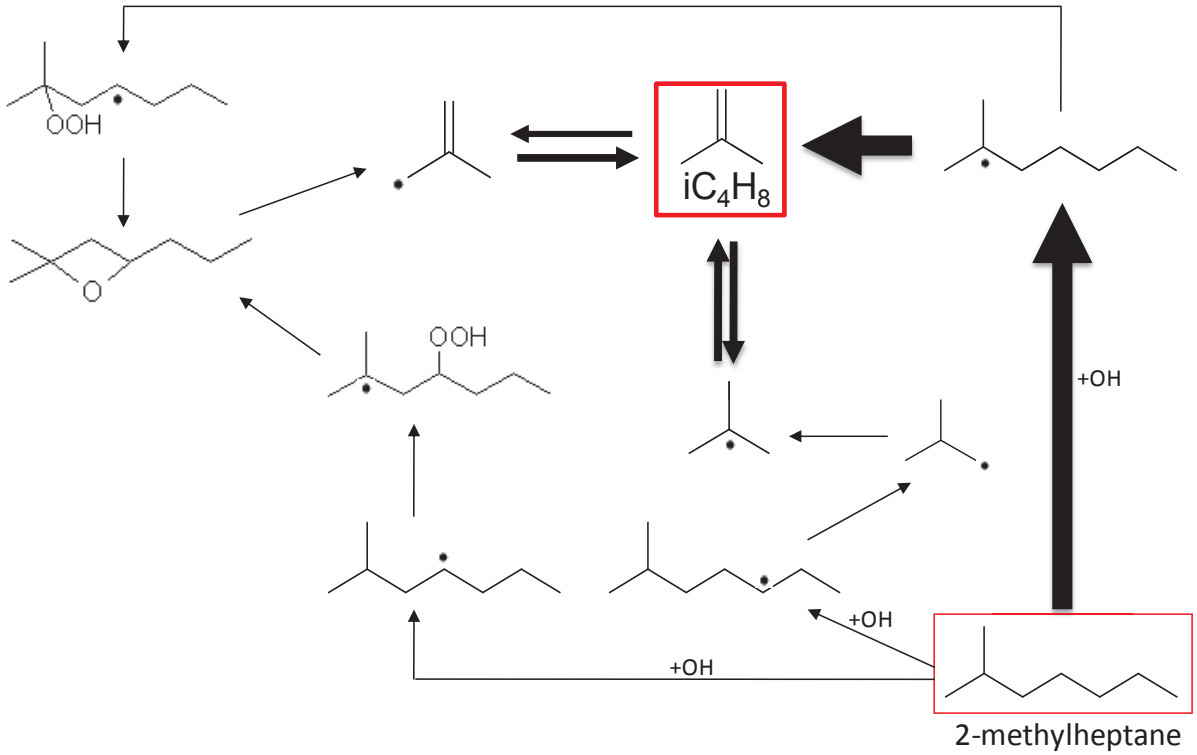


Figure VII.20 : Analyse des flux réactionnels pour la formation de l'isobutène avec le nouveau modèle à quatre constituants du GtL à φ = 1 ; τ = 0.7 s et à 830 K

Afin de déterminer les réactions influant le plus la consommation des différents carburants, nous avons effectué des analyses de sensibilité sur plusieurs espèces. Ces analyses ont été menées pour un mélange stœchiométrique et à haute pression (10 atm). Les résultats obtenus sont présentés sur la figure VII.21. On peut y voir les analyses de sensibilité pour le radical OH au maximum de la flamme froide (650 K), pour CO_2 à 1030 K lorsque qu'il ne reste quasiment que les produits de fin de combustion, pour l'éthylène, pour le propène et l'isobutène à leur maximum de formation à haute température (830 K).

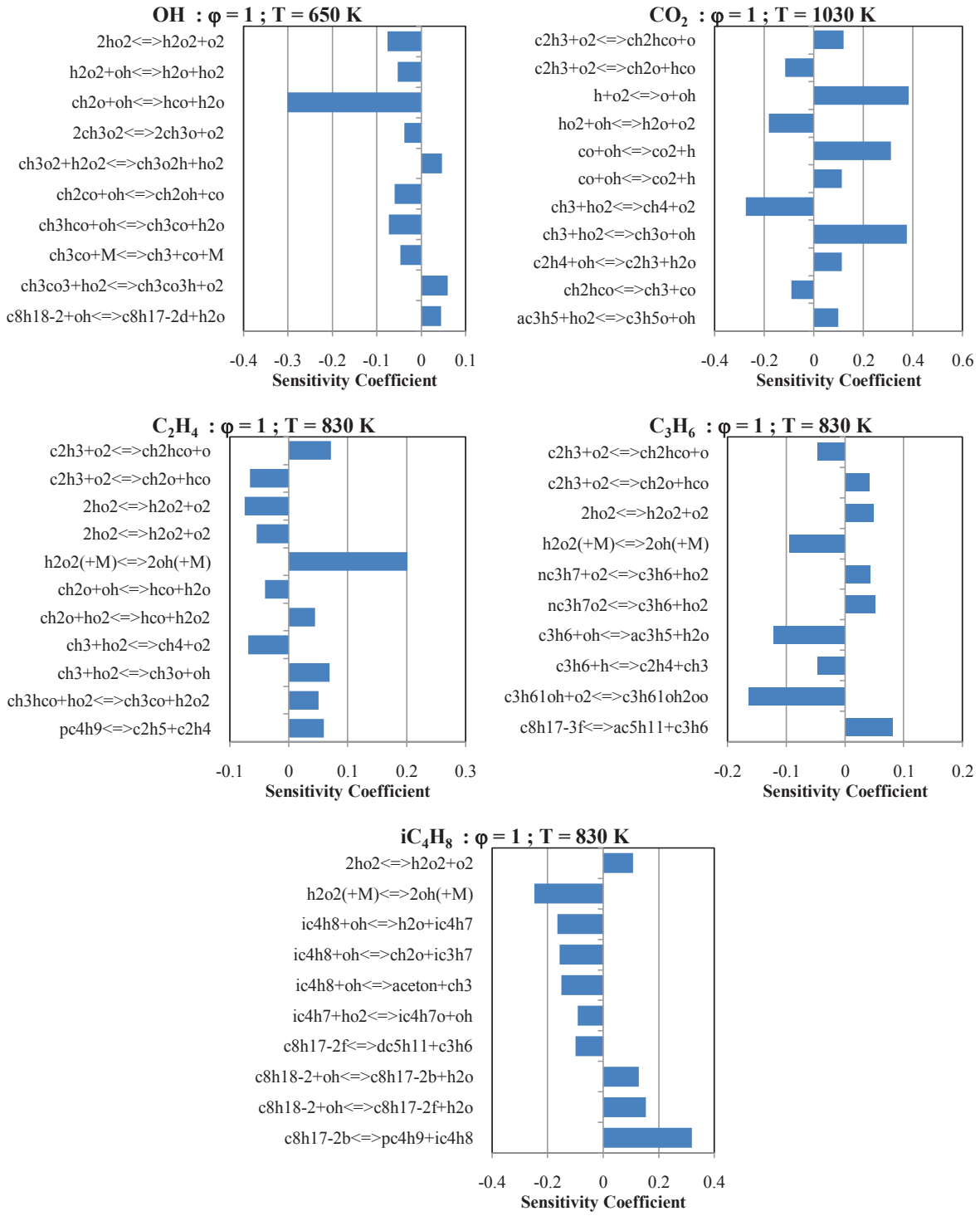


Figure VII.21 : Analyses de sensibilité relatives à la formation de OH à 650 K, CO_2 à 1030 K, C_2H_4, C_3H_6 et iC_4H_8 à 830 K lors de l'oxydation du modèle du GtL en réacteur auto-agité (φ=1, 10 atm, τ=0.7 s)

Ces analyses de sensibilité donnent quasiment les mêmes résultats que ceux obtenus avec le SPK. En d'autres termes, à l'exception de quelques réactions peu sensibles de β-scission ou de métathèse du 2-méthylheptane et du 3-méthylheptane, on remarque que le modèle est principalement sensible à des réactions impliquant des petites espèces. Cela

signifie que le modèle n'est pas très sensible à la cinétique de combustion des hydrocarbures présents dans le carburant-modèle.

Enfin, nous avons déterminé l'origine de la formation des radicaux OH de façon à comprendre quels hydrocarbures présents initialement dans le carburant-modèle étaient responsables de la réactivité globale du système, fortement liée aux réactions de OH. Pour cela nous avons effectué une analyse des voies réactionnelles à haute température, au niveau du pic de formation des intermédiaires (830 K). Les résultats obtenus sont présentés dans la figure VII.22.

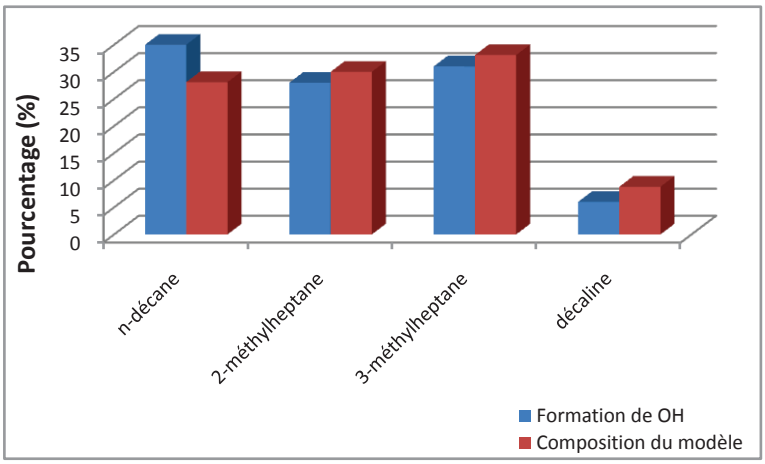


Figure VII.22 : Responsabilité de chaque hydrocarbure du modèle sur la formation des radicaux OH
Analyse des voies réactionnelles à φ=1, 830 K, τ=0.7s, 10 atm

Sur cette figure on constate que les pourcentages de formation de OH obtenus sont très liés à la composition initiale du carburant-modèle. En revanche, on peut tout de même remarquer certaines différences liées notamment à la réactivité individuelle des hydrocarbures. En effet, on peut voir que le n-décane contribue plus à la formation de OH par rapport à sa concentration initiale dans le carburant-modèle. Ceci vient de son fort indice de cétane (~77) et donc de sa réactivité très élevée. A l'inverse, on constate que le 2-méthylheptane (CN ~47) et le 3-méthylheptane (CN ~45) [5] induisent une formation sensiblement plus faible par rapport à leur concentration initiale dans le carburant-modèle. Ceci vient de leur réactivité (indice de cétane) très légèrement plus faible par rapport à celle du mélange global (CN ~56).

7.2.3 Confrontation expérience-modèle pour l'oxydation du kérosène de synthèse CtL

L'oxydation du kérosène synthétique de type CtL a été simulée grâce à un carburant-modèle développé sur la base des travaux de Mzé-Ahmed *et al.* [2] ainsi que sur les travaux de thèse du même auteur [4]. Celui-ci est constitué de sept hydrocarbures avec les fractions massiques suivantes : 5,7% de n-décane, 11,5% d'iso-octane, 24,8% de 3-méthylheptane, 16,1% de n-propylcyclohexane, 28,3% de décaline, 4% de n-propylbenzène et 9,6% de tétraline.

Les profils de concentration expérimentaux et simulés des intermédiaires stables et produits de combustion majoritaires, issues de l'oxydation du CtL pour le mélange stœchiométrique, sont présentés sur la figure VII.23. Les profils des réactifs ne sont pas représentés et comparés en raison du nombre très important de molécules présentes initialement dans ce kérosène synthétique.

Sur cette figure, on constate que notre nouveau modèle simule bien l'ensemble des profils d'espèces principales. En effet, les profils de concentration de l'eau, du CO, du CO_2, du formaldéhyde, du propène et de l'acétaldéhyde sont correctement représentés dans toute la gamme de température. Le méthane et l'éthylène sont aussi bien représentés par le modèle. La formation d'isobutène est de même bien reproduite, ainsi que celle de but-1-ène.

Cependant, on peut voir que le modèle surestime légèrement la formation de buta-1,3-diène, de propèn-2-al et d'oxirane à haute température et sous-estime celle d'hydrogène. Les profils du propanal, de l'acétylène, du pent-1-ène, du hex-1-ène et du cis et trans-but-2-ène sont bien simulés. On peut voir aussi que le modèle surestime légèrement la formation de 2-méthylbut-1-ène à basse et haute température. La consommation de l'oxygène est bien prédite.

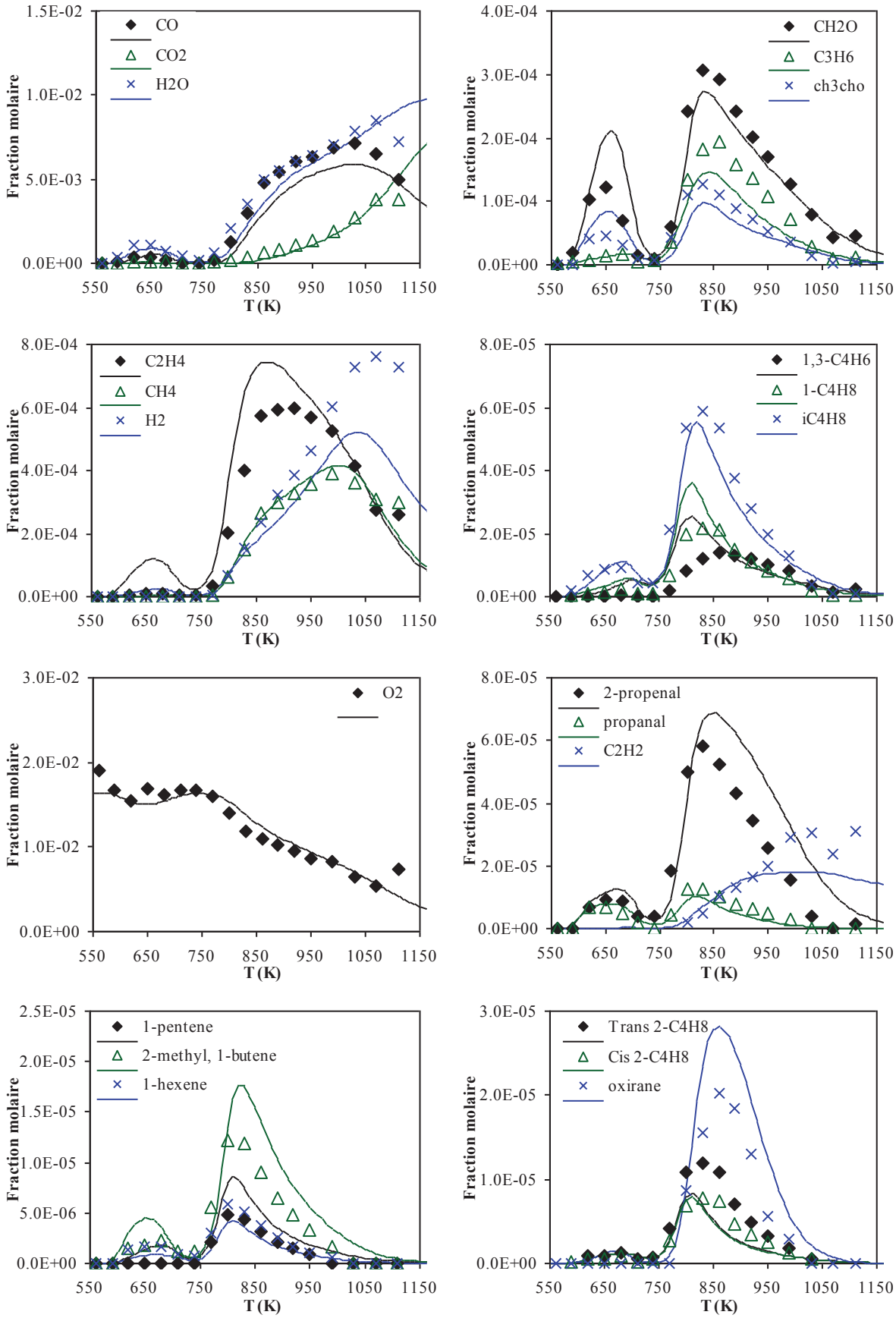


Figure VII.23 : Confrontation expérience (symboles)-modèle (traits pleins) pour l'oxydation du CtL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,646% ; X_{N2}=98,254% ; carburant-modèle : $X_{modèle}$=0,1229% ; X_{O2}=1,6407% ; X_{N2}=98,2364%

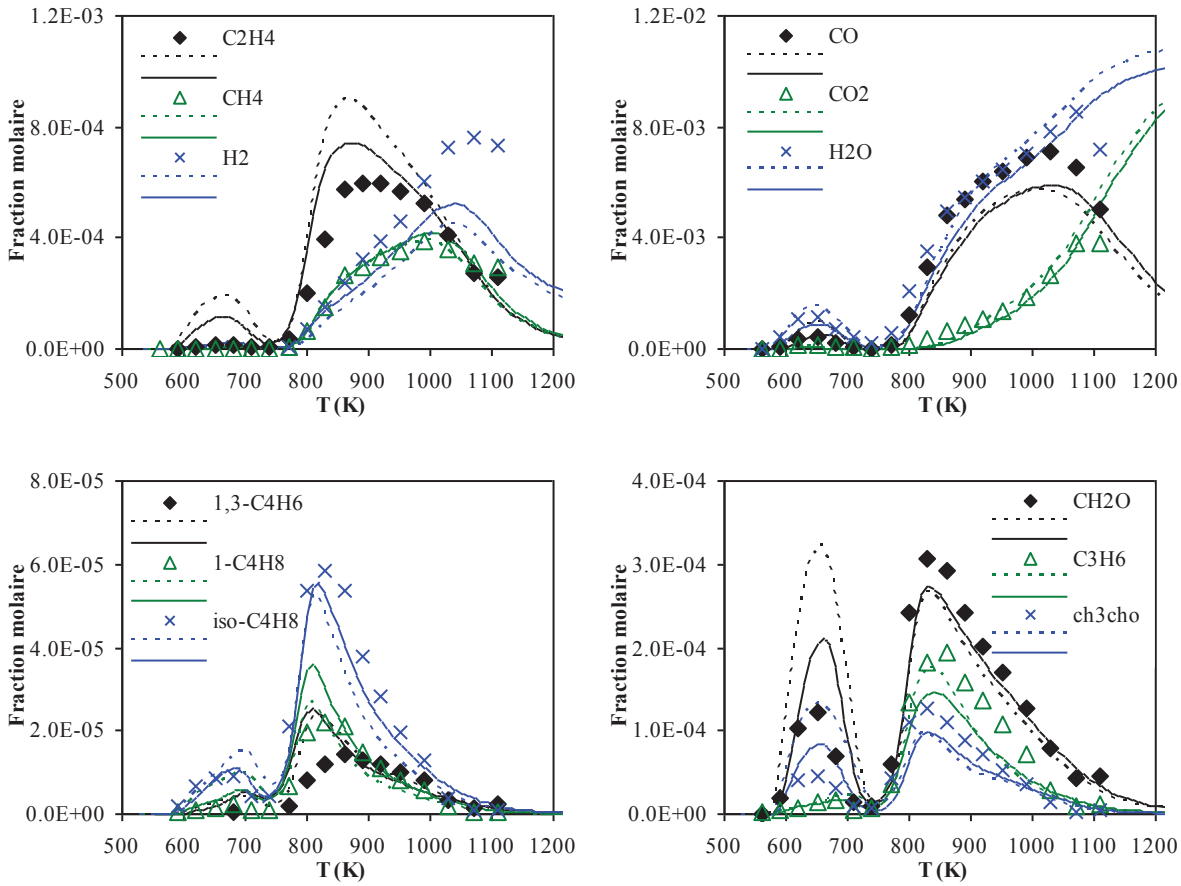


Figure VII.24 : Confrontation expérience (symboles)-ancien modèle (pointillés)-nouveau modèle (traits pleins) pour l'oxydation du CtL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =0,7 s ; φ=1 ; X_{CtL}=0,1% ; $X_{ancien\ modèle}$=0,1194% ; $X_{nouveau\ modèle}$=0,1229%

Afin de confirmer la validité de ce nouveau carburant-modèle nous avons comparé les résultats obtenus par modélisation avec ceux obtenus avec l'ancien carburant-modèle composé (en %massiques) de 43,1% de n-décane, 11,4% d'iso-octane, 36,1% de n-propylcyclohexane et de 9,4% de n-propylbenzène. La figure VII.24 présente la comparaison entre ces deux modèles et les résultats expérimentaux obtenus lors de l'oxydation du CtL. On peut voir sur cette figure un certain nombre de différences entre les profils simulés issus des deux modèles, notamment une baisse significative de la réactivité du nouveau modèle ce qui représente une amélioration considérable de la simulation des données expérimentales.

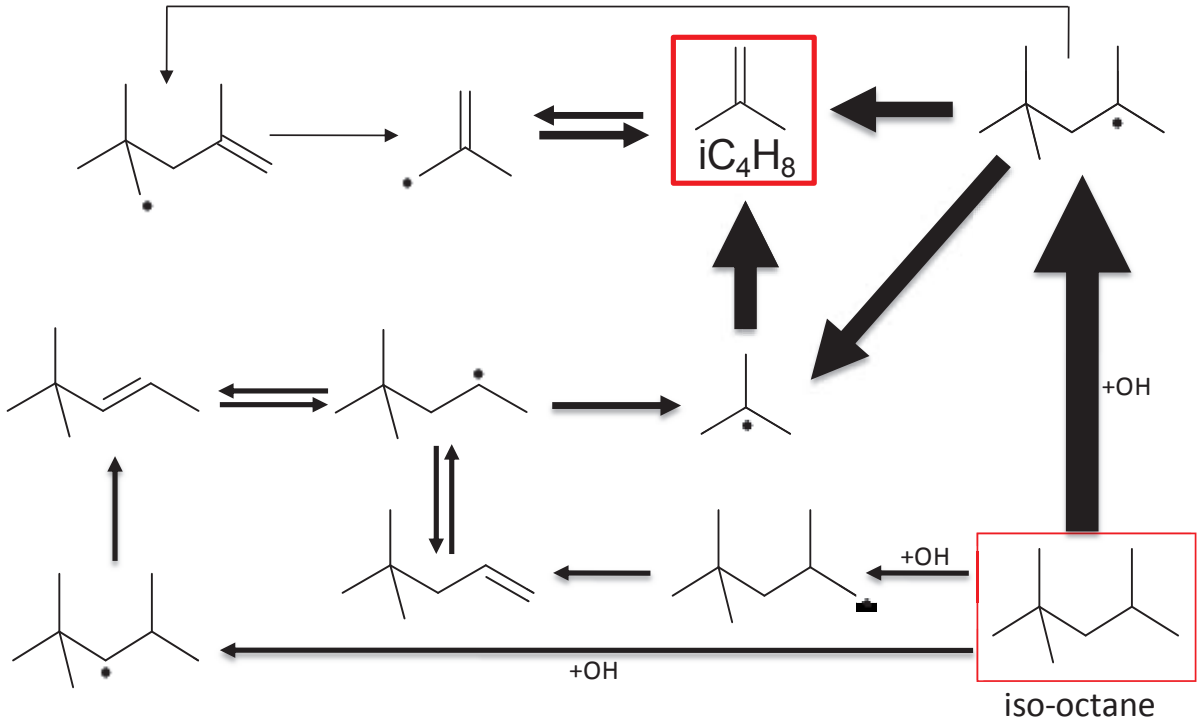


Figure VII.25 : Analyse des flux réactionnels pour la formation de l'isobutène avec le nouveau modèle à sept composés du CtL à $\varphi = 1$; $\tau = 0.7$ s et à 830 K

Sur la figure VII.25 est présentée une analyse des voies réactionnelles, obtenue avec le nouveau carburant-modèle constitué d'iso-octane et de 3-méthylheptane pour représenter les iso-paraffines. On constate sur cette figure que l'isobutène provient uniquement de l'oxydation de l'iso-octane, ce qui reste cohérent avec les analyses menées précédemment pour l'oxydation du SPK et du GtL.

Dans le but de déterminer les réactions ayant un rôle important dans la consommation des différents carburants, nous avons effectué des analyses de sensibilité sur plusieurs espèces. Ces analyses ont été menées pour un mélange stœchiométrique oxydé à haute pression (10 atm). Les résultats obtenus sont présentés sur la figure VII.26. On peut voir sur cette figure les analyses de sensibilité pour le radical OH à 650 K, CO_2 à 1030 K, ainsi que pour l'éthylène, le propène et l'isobutène à 830 K.

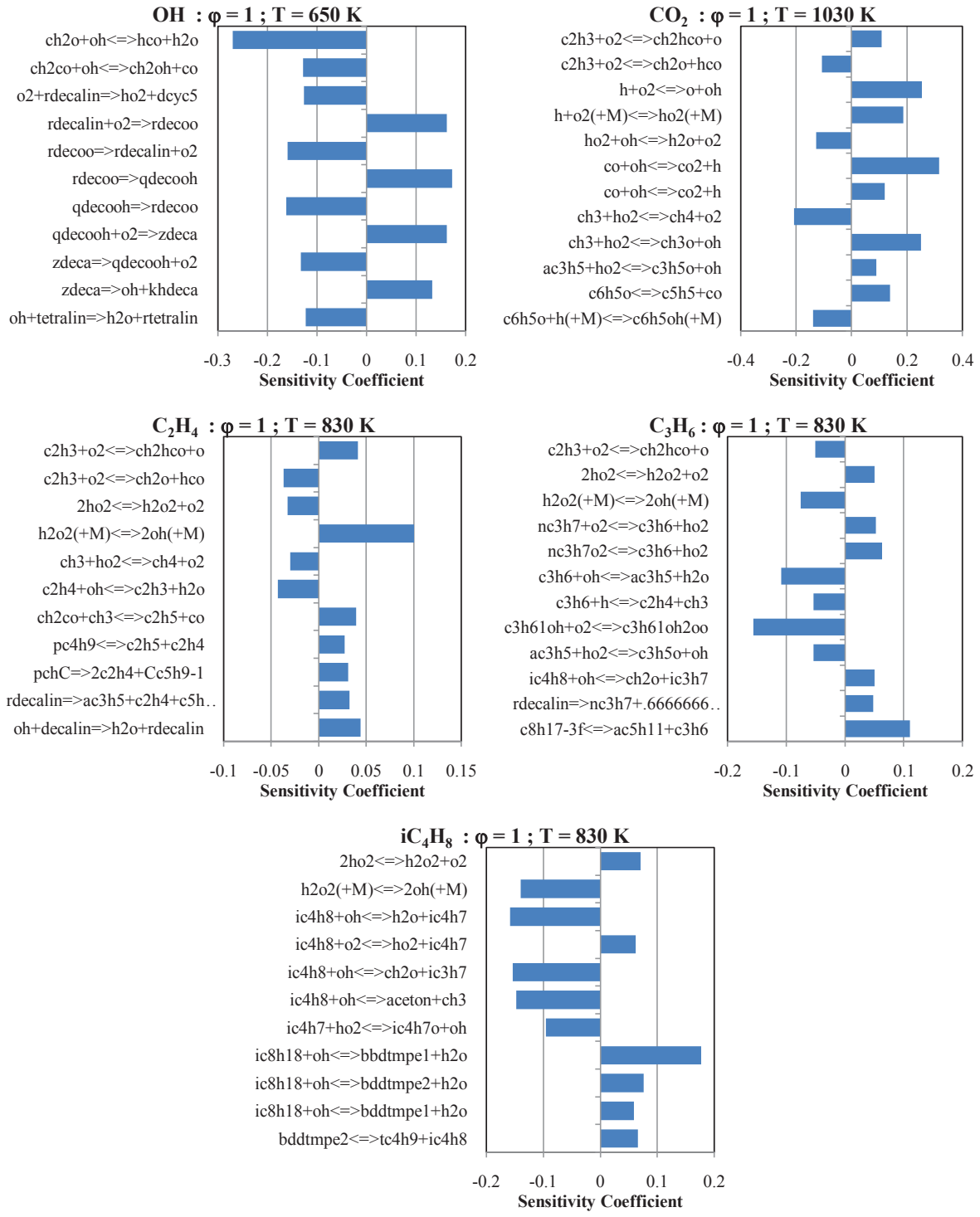


Figure VII.26 : Analyses de sensibilité relatives à la formation de OH à 650 K, CO_2 à 1030 K, C_2H_4, C_3H_6 et iC_4H_8 à 830 K lors de l'oxydation du modèle du CtL en réacteur auto-agité (φ=1, 10 atm, τ=0.7 s)

Ces analyses de sensibilité montrent certaines différences par rapport aux analyses des deux précédents carburants-modèles. En effet, l'analyse de sensibilité pour le radical OH indique qu'une majorité de réactions impliquant la **décaline** ou des radicaux et intermédiaires stables provenant de celle-ci, notamment des réactions de chimie de basse température sont

influentes. Cela signifie qu'à basse température la réactivité du modèle est liée à la cinétique des réactions de la décaline. A haute température, on peut voir sur l'analyse relative à CO_2 que les réactions sensibles à sa formation impliquent surtout des petites espèces. Cela implique qu'à haute température le modèle n'est pas très sensible à la cinétique de d'oxydation des hydrocarbures présents dans le carburant-modèle. On peut constater cette même tendance à 830 K d'après les analyses menées pour C_2H_4, C_3H_6 et iC_4H_8, hormis quelques réactions faisant intervenir la décaline, le 3-méthylheptane et l'iso-octane. En effet, on peut voir que des réactions de métathèses et de β-scissions de la décaline ont un effet positif sur la formation de l'éthylène et du propène. Une réaction de β-scission d'un radical primaire du 3-méthylheptane influe également sur la formation du propène. L'analyse de sensibilité relative à l'isobutène indique que les réactions sensibles à sa formation sont quasiment toutes liées à l'oxydation de l'iso-octane.

Enfin, nous avons identifié quels hydrocarbures présents initialement dans le carburant-modèle étaient responsables de la réactivité globale du système. Pour cela nous avons effectué une analyse des voies réactionnelles pour déterminer l'origine de la formation des radicaux OH. Cette analyse a été effectuée à haute température, au niveau du pic de formation des intermédiaires (830 K). Les résultats obtenus sont présentés dans la figure VII.27.

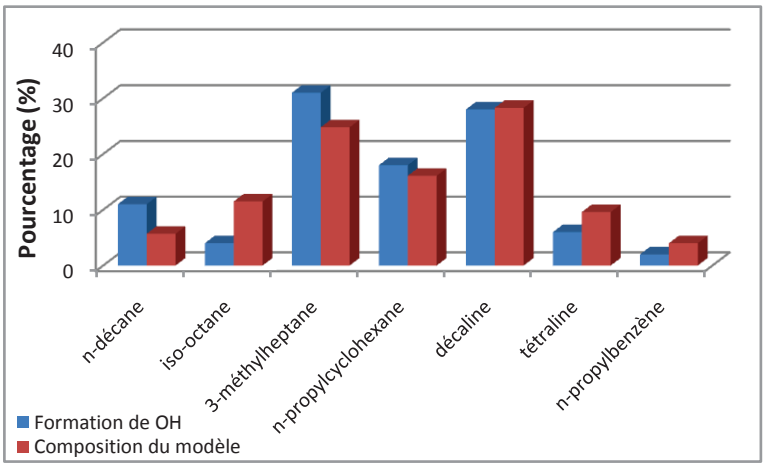


Figure VII.27 : Responsabilité de chaque hydrocarbure du modèle sur la formation des radicaux OH
Analyse des voies réactionnelles à φ=1, 830 K, τ=0.7s, 10 atm

On peut voir que les pourcentages de formation de OH obtenus sont liés à la composition initiale du carburant-modèle. En revanche, certaines différences sont visibles notamment pour le n-décane et l'iso-octane. Comme indiqué précédemment, ceci vient de leur

réactivité respective par rapport à celle du mélange global (~49). On peut de plus voir que la majeure partie des radicaux OH vient de l'oxydation du 3-méthylheptane et de la décaline, avec des pourcentages liés à leurs concentrations initiales dans le carburant-modèle.

7.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté dans une première partie la confrontation entre les résultats expérimentaux et simulés obtenus pour l'oxydation de mélanges d'hydrocarbures représentant des kérosènes de synthèse. Ces confrontations ont permis de valider le modèle sur des mélanges complexes et pas seulement sur des données issues de l'oxydation d'hydrocarbures purs. Nous avons pu voir que le modèle cinétique simule correctement l'ensemble des données sur tout le domaine de température étudié.

Dans la deuxième partie de ce chapitre, les nouvelles données expérimentales obtenues pour l'oxydation des trois kérosènes de synthèse (SPK, GtL et CtL) ont été confrontées avec les résultats de simulations obtenues grâce aux nouveaux carburants-modèles développés pour chacun de ces kérosènes. Nous avons de plus comparé ces résultats à ceux obtenus avec les carburants-modèles développés précédemment [1, 2] pour représenter ces mêmes kérosènes. Ces résultats ont montré une amélioration significative de la simulation des données expérimentales par l'utilisation de ces carburants-modèles plus complexes.

Nous avons aussi effectué des analyses de voies réactionnelles afin de comprendre la provenance de l'isobutène en utilisant des carburants-modèles composés de plusieurs iso-paraffines. Ces analyses ont montré que lorsqu'il est présent, l'iso-octane est le principal responsable de la formation de l'isobutène, suivi du 2-méthylheptane. Le 3-méthylheptane n'en forme quasiment pas mais permet ainsi de réguler la formation de cette espèce en introduisant dans le modèle la quantité réelle d'iso-paraffines.

Enfin, nous avons effectué des analyses de sensibilité sur plusieurs espèces à différentes températures avec les carburants-modèles des trois kérosènes. Ces analyses ont montré que les carburants-modèles du GtL et du SPK ne sont pas très sensible à la cinétique

d'oxydation des hydrocarbures présents initialement dans les carburants-modèles. En revanche, avec le carburant-modèle du CtL, la formation et la consommation des radicaux OH à basse température sont très dépendantes des réactions de consommation de la décaline, présente en plus grande quantité dans ce modèle.

Références bibliographiques

[1] P. Dagaut, F. Karsenty, G. Dayma, P. Diévart, K. Hadj-Ali, A. Mzé-Ahmed, M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, T. Kathrotia, T. Kick, C. Naumann, U Riedel, L. Thomas

Experimental and Detailed Kinetic Model for the Oxidation of a Gas to Liquid (GtL) Jet Fuel, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 835-847

[2] A. Mzé-Ahmed, P. Dagaut, K. Hadj-Ali, G. Dayma, T. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, C. Naumann, U Riedel

Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study, Energy & Fuels, 2012, vol. 26, pp. 6070–6079

[3] A. Mzé-Ahmed, K. Hadj-Ali, P. Diévart, P. Dagaut

Kinetics of oxidation of a synthetic jet fuel in a jet-stirred reactor: experimental and modeling study, Energy & Fuels, 2010, vol. 24, pp. 4904-4911

[4] A. Mzé Ahmed

Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants-modèles - Formation de polluants, Thèse, Université d'Orléans 2011

[5] R.C. Santana, P.T. Do, M. Santikunaporn, W.E. Alvarez, J.D. Taylor, E.L. Sughrue, D.E. Resasco

Evaluation of different reaction strategies for the improvement of cetane number in diesel fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 643–656

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale et perspectives

Dans cette thèse, nous avons étudié expérimentalement la cinétique d'oxydation de plusieurs kérosènes synthétiques d'origines et de compositions variées, ainsi que celle de composés purs représentant la famille chimique des iso-paraffines, présente en quantité importante dans les kérosènes de synthèse. Nous avons ensuite étudié expérimentalement la cinétique d'oxydation de mélanges d'hydrocarbures représentatifs de chaque famille chimique présente dans ces kérosènes alternatifs. Ces travaux ont été menés en réacteur parfaitement agité, dans une large gamme de conditions opératoires et nous ont permis d'observer les principaux mécanismes d'oxydation des carburants afin de les comparer entre eux : flamme froide, coefficient négatif de température et oxydation de haute température. Les échantillons prélevés au cours de ces expériences ont été analysés à l'aide de différentes techniques analytiques comme la chromatographie en phase gazeuse couplée à différents détecteurs (TCD, FID et MS) et la spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier. Ces techniques nous ont permis d'identifier et de quantifier de nombreux produits de combustion formés lors de nos expériences. Nous avons ensuite développé un modèle cinétique chimique détaillé, capable de simuler l'oxydation des carburants étudiés.

La première partie de ces travaux de thèse a porté sur l'étude expérimentale de l'oxydation de trois iso-paraffines en réacteur auto-agité afin de mieux représenter cette famille chimique dans nos modélisations de l'oxydation d'un kérosène de synthèse. Les trois hydrocarbures étudiés sont deux isomères de l'iso-octane (2-méthylheptane et 3-méthylheptane), ainsi que le 2-méthylnonane comportant une chaîne carbonée plus longue. Les expériences ont été menées à pression élevée (10 atm), dans une large gamme de températures, pour trois richesses de mélange et pour un temps de passage constant de 0,7 s. Ces expériences ont permis de comparer l'oxydation de ces iso-paraffines en confrontant les profils de concentration des réactifs, produits et intermédiaires stables en fonction de la température. Il apparaît que la nature des espèces formées est essentiellement dépendante de la structure de ces molécules. La longueur de la chaîne carbonée influence également la nature des intermédiaires stables lourds, mais a principalement un impact sur la réactivité de ces iso-paraffines et sur la concentration des produits formés.

Dans le deuxième volet de cette thèse, nous avons mené une série d'expériences afin d'obtenir de nouvelles données expérimentales sur la cinétique d'oxydation de trois kérosènes de synthèse produits par la synthèse Fischer-Tropsch : un SPK, un GtL et un CtL. Nous avons ensuite procédé à l'étude expérimentale de la cinétique d'oxydation de mélanges modèles développés pour représenter l'oxydation de ces trois kérosènes synthétiques. Les mélanges modèles représentant l'oxydation du SPK ont été développés dans le but de remplacer l'iso-octane pour représenter la famille chimique des iso-paraffines. Le 2-méthylnonane s'est révélé beaucoup trop réactif pour représenter cette famille dans un kérosène de synthèse. Les résultats obtenus lors de l'étude des mélanges représentant le GtL et le CtL ont eu pour but d'améliorer le modèle existant en se rapprochant de la composition de départ du kérosène étudié. Pour cela, le n-propylcyclohexane a été remplacé par de la décaline, en partie dans le cas du CtL et totalement pour le GtL. Cependant, pas de différences notoires ont été observées après l'ajout de cette espèce, hormis une légère baisse de la réactivité. Un troisième mélange modèle a été développé pour représenter l'oxydation du CtL en modifiant la proportion de chacun des composés avec pour but de mieux reproduire la réactivité de ce kérosène. Cela a permis une amélioration de la concordance des profils d'espèces à l'exception de l'isobutène. Il a ainsi été montré que pour améliorer ces modèles il est nécessaire de se rapprocher de la composition de ces kérosènes en ajoutant ou en remplaçant plusieurs composés dans les mélanges modèles.

Un mécanisme cinétique chimique détaillé a ensuite été développé afin de modéliser l'oxydation de ces trois kérosènes de synthèse et leurs mélanges respectifs dans diverses conditions. Ce mécanisme a initialement été élaboré par Diévart [1] dans ses travaux de thèses pour simuler l'oxydation du kérosène conventionnel. Puis il a été repris et complété par Mzé-Ahmed [2] afin de simuler l'oxydation de kérosènes reformulés en ajoutant le sous-mécanisme de l'iso-octane. Nous avons ensuite rajouté à ce mécanise les sous-mécanismes du 2-méthylheptane [3], du 3-méthylheptane [4], de la décaline [5] et de la tétraline [6]. Ce mécanisme comprend ainsi les sous-mécanismes du n-décane, de l'iso-octane, du n-propylcyclohexane, du n-propylbenzène, du 2-méthylheptane, du 3-méthylheptane, de la décaline et de la tétraline. Finalement, celui-ci est constitué de 10962 réactions (généralement réversibles) faisant intervenir 2430 espèces. Nous avons aussi développé des mélanges modèles pouvant contenir jusqu'à 8 composés de façon à représenter au mieux l'oxydation des kérosènes de synthèses, en se rapprochant au maximum de leur composition et de leurs propriétés physico-chimiques.

Initialement, nous avons modélisé l'oxydation de composés purs afin de valider les sous-mécanismes développés dans ce travail. On a pu voir que le modèle reproduit convenablement l'oxydation de la plupart de ces molécules, même si quelques améliorations restent encore à apporter pour certaines en réacteur auto-agité. Pour ce qui est de la modélisation des délais d'auto-inflammation, on a constaté leur surestimation par le modèle lors des confrontations expérience-modélisation, excepté pour le n-propylcyclohexane. On notera que pour ce dernier les expériences ont été menées en dilution dans l'argon, alors que toutes les autres ont été menées dans l'air. On en déduit que le mécanisme proposé n'est pas bien adapté à la modélisation des délais d'auto-inflammation de mélanges hydrocarbure/air.

Dans un deuxième temps, nous avons modélisé les données expérimentales obtenues lors de l'oxydation des mélanges d'hydrocarbures. Ces études ont permis de valider le modèle cinétique sur des résultats d'expériences impliquant des mélanges de compositions parfaitement connues et représentatives de celles des carburéacteurs étudiés ici. Nous avons pu voir que le modèle simule correctement l'ensemble des données sur tout le domaine de température étudié en réacteur parfaitement agité.

Enfin, nous avons confronté les nouvelles données expérimentales obtenues pour l'oxydation des trois kérosènes de synthèse (SPK, GtL et CtL) avec les résultats de simulation obtenus grâce aux nouveaux carburants-modèles développés pour chacun de ces kérosènes. Nous avons de plus comparé ces résultats à ceux obtenus avec les précédents carburants-modèles développés [7, 8, 9] pour représenter ces mêmes kérosènes. Ces résultats ont montré une amélioration significative de la simulation des données expérimentale par l'utilisation des nouveaux carburants-modèles plus complexes. Nous avons aussi effectué des analyses de voies réactionnelles afin de déterminer la provenance de l'isobutène. Ces résultats ont mis en évidence que l'iso-octane est le principal responsable de la formation de cette espèce, suivi par le 2-méthylheptane. En revanche, le 3-méthylheptane n'en forme quasiment pas. Des analyses de sensibilité ont de plus permis de mettre en évidence que les carburants-modèles du GtL et du SPK ne sont pas très sensible à la cinétique d'oxydation des hydrocarbures présents initialement dans les carburants-modèles. En revanche, avec le carburant-modèle du CtL, la formation et la consommation des radicaux OH à basse température sont très dépendantes des réactions de consommation de la décaline, présente en plus grande quantité dans ce modèle. Pour finir, des analyses de voies réactionnelles ont montré que les radicaux

OH, principaux responsables de la réactivité des mélanges, proviennent des différents hydrocarbures modèles dans des proportions assez similaires à la composition de ces carburants-modèles.

Les mécanismes et carburants-modèles développés dans cette thèse apportent des résultats convainquants, bien que certaines améliorations soient nécessaires afin de mieux prévoir la formation des produits et intermédiaires. Il pourrait aussi être intéressant de chercher une nouvelle iso-paraffine, peut être avec une chaîne carbonée plus longue et légèrement plus ramifiée que les molécules étudiées ici, afin de mieux satisfaire aux exigences de la modélisation. Cependant, la disponibilité et le coût de ces molécules limitent fortement les études. Enfin, dans le but de confirmer la validité du mécanisme et des modèles cinétiques, il pourrait être profitable de les tester dans un plus large domaine de conditions expérimentales (tube à choc, machine à compression rapide, flamme).

Références bibliographiques

[1] A. Mzé Ahmed

Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants-modèles - Formation de polluants, Thèse, Université d'Orléans 2011

[2] P. Diévart

Oxydation en milieu ultra-pauvre de carburants types gazoles. Étude expérimentale en réacteur auto-agité et modélisation, Thèse, Université d'Orléans 2008

[3] S. M. Sarathy, C. K. Westbrook, M. Mehl, W. J. Pitz, C. Togbé, P. Dagaut, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger, U. Niemann, K. Seshadri, P. S. Veloo, C. Ji, F. N. Egolfopoulos, T. Lu,

Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C7 to C20, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 2338-2357

[4] F. Karsenty, S. M. Sarathy, C. Togbé, C. K. Westbrook, G. Dayma, P. Dagaut, M. Mehl, W. J. Pitz

Experimental and Kinetic Modeling Study of 3-Methylheptane in a Jet-Stirred Reactor, Energy & Fuels, 2012, vol.26, pp. 4680–4689

[5] P. Dagaut, A. Ristori, A. Frassoldati, T. Faravelli, G. Dayma, E. Ranzi

Experimental and semi-detailed kinetic modeling study of decalin oxidation and pyrolysis over a wide range of conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 2012, vol. 34, pp. 289-296

[6] P. Dagaut, A. Ristori, A. Frassoldati, Ti. Faravelli, G. Dayma, and E. Ranzi

Experimental Study of Tetralin Oxidation and Kinetic Modeling of its Pyrolysis and Oxidation, Energy & Fuels, 2013, vol. 27, pp. 1576–1585

[7] A. Mzé-Ahmed, K. Hadj-Ali, P. Diévart, P. Dagaut

Kinetics of oxidation of a synthetic jet fuel in a jet-stirred reactor: experimental and modeling study, Energy & Fuels, 2010, vol. 24, pp. 4904-4911

[8] P. Dagaut, F. Karsenty, G. Dayma, P. Diévart, K. Hadj-Ali, A. Mzé-Ahmed,

M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, T. Kathrotia, T. Kick, C. Naumann, U Riedel, L. Thomas

Experimental and Detailed Kinetic Model for the Oxidation of a Gas to Liquid (GtL) Jet Fuel, Combustion and Flame, 2014, vol. 161, pp. 835-847

[9] A. Mzé-Ahmed, P. Dagaut, K. Hadj-Ali, G. Dayma, T. Kick, J. Herbst, T. Kathrotia M. Braun-Unkhoff, J. Herzler, C. Naumann, U Riedel

Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study, Energy & Fuels, 2012, vol. 26, pp. 6070–6079

Annexes

Annexe-I : Caractéristiques des appareils utilisés.....271
Annexe-II : Récapitulatif des expériences effectuées en réacteur parfaitement agité.....273
Annexe-III : Mécanisme cinétique 275
Annexe-IV : Données thermodynamiques 341

Annexe-I : Caractéristiques des appareils utilisés

Dans le tableau AI-1 sont présentés les quatre chromatographes ainsi que le spectromètre IRTF utilisés pour analyser les gaz de combustion en sortie du réacteur auto-agité.

Tableau AI-1 : Caractéristiques des différents chromatographes utilisés

Chromatographe	**Colonnes**	**Gaz vecteur**	**Programmation de température**	**Détecteur**	**Composés détectés**
N°1 : Varian 3400	CP-Al_2O_3/KCl L = 50 m D_{int} = 0.32 mm D_f = 5 µm	He 1,5 mL.min^{-1}	Ti = 70°C ti = 0 min v = 10°C/min T_f = 200°C t_f= 10 min	FID	HC<C_7
N°2 : Varian 3300	CP-Carboplot P7 L=25 m D_{int} = 0,53 mm D_f= 50 µm	N2 15 mL.min-1	T = 50°C t = 5 min isotherme	TCD	H_2 O_2
N°3 : Varian CP 3800	DB624 L = 30 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 1,80 µm	He 0,7 mL.min^{-1}	Ti = 32°C ti = 20 min v_f = 20°C/min T_f = 150°C t_f = 1 min	FID + spectromètre de masse Varian 1200	HC oxygénés
N°4 : Shimadzu GC 2010 Plus	DB624 L = 60 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 1,80 µm	He 0,7 mL.min^{-1}	T_i = 40°C t_i = 10 min v_1 = 7°C/min T_1 = 140°C t_1 = 12 min v_2 = 2°C/min T_2 = 200°C t_2 = 6 min v_3 = 15°C/min T_f = 250°C t_f = 1 min	FID + Spectromètre de masse Shimadzu GCMS-QP 2010 SE	HC oxygénés

Tableau AI-2 : Paramètres d'acquisition du spectromètre IRTF

Type	Nexus thermo Nicolet
Pression de prélèvement	200 mB
Température de la cellule	140 °C
Chemin optique	10 m
Balayages	32 scans
Résolution	0,5 cm^{-1}
Vitesse du miroir	0,63 cm/s
Zero filling	0 niveau
Apodisation	Happ-Genzel
Temps d'acquisition	120 secondes

Annexe-II : Récapitulatif des expériences effectuées en réacteur parfaitement agité

Tableau AII- 1 : Récapitulatif des expériences effectuées en réacteur parfaitement agité

Carburant	Composition (%massique)	Caractéristiques	Conditions expérimentales	Remarques
SPK 7603 (IFP)	iso-paraffines : 79,88 % n-paraffines : 19,63 % aromatiques : 0,49 %	$C_{11,5}H_{24,41}$ H/C : 2,12 CN : 45,45	P=10 bar τ=0,7 φ=0,5 ; 1 ; 2 T : 560-1110 K	
Carburants modèles				
Iso-alcanes	2-méthylheptane : 100%	C_8H_{18} ; H/C : 2,25	P=10 bar τ=0,7 φ=0,5 ; 1 ; 2 T : 560-1110 K	- Bonne réactivité - Surproduction d'isobutène (~ 50 ppm) - Surproduction de 300 ppm d'éthylène
	3-méthylheptane : 100%	C_8H_{18} ; H/C : 2,25	P=10 bar τ=0,7 φ=0,5 ; 1 ; 2 T : 560-1110 K	- Bonne réactivité - Forme environ 5 fois moins d'isobutène - Surproduction d'éthylène (~ 600ppm)
	2,5-diméthylhexane : 100%	C_8H_{18} ; H/C : 2,25	P=10 bar τ=0,7 φ=0,5 ; 1 ; 2 T : 560-1110 K	- Plus faible réactivité - Forme environ 5 fois trop d'isobutène - Sous-production de 200 ppm d'éthylène
	2-méthylnonane : 100 %	$C_{10}H_{22}$; H/C : 2,2	P=10 bar τ=0,7 φ=0,5 ; 1 ; 2 T : 560-1110 K	- Réactivité beaucoup trop élevée - Forme trop d'isobutène (~ 50 ppm) - Surproduction de 300 ppm d'éthylène
Surrogate 1	2-méthylnonane : 80 % n-décane : 19,5 % n-butylbenzène : 0,5 %	$C_{10}H_{21,96}$ H/C : 2,20 CN : 59	P=10 bar τ=0,7 φ=0,5 ; 1 ; 2 T : 560-1110 K	- Réactivité du mélange trop élevée - Légère surproduction de 15 ppm d'isobutène - Sous-production de 130 ppm de méthane
Surrogate 2	2-méthylnonane : 19,5% n-décane : 80 % n-butylbenzène : 0,5 %	$C_{10}H_{21,96}$ H/C : 2,20 CN : 72	P=10 bar τ=0,7 φ=0,5 ; 1 ; 2 T : 560-1110 K	- Réactivité du mélange trop élevée - Formation d'isobutène 4 fois moins importante
GTL 8069 (Shell)	n-paraffines : 28,1 % iso-paraffines : 62,8 % di-naphtènes : 8,2 % mononaphtènes : 0,6 % aromatiques : 0,2 %	$C_{10,45}H_{23,06}$ H/C : 2,20 CN : 57,94	P=10 bar τ=0,7 φ=1 T : 560-1110 K	
Carburants modèles				

Surrogate 0	n-décane : 62 ,4 % iso-octane : 28,8 % n-pch : 8,8 %	$C_{9,24}H_{20,31}$ H/C : 2,20 CN : 54,6	P=10 bar τ=0,7 φ=1 T : 560-1110 K	- Réactivité légèrement inférieure à HT - Surproduction de 15 à 20% de méthane, ethylène, propène et 1-butène - Surproduction de 5 fois plus d'isobutène - Légère surproduction d'acétylène
Surrogate 1	n-décane : 62,4 % iso-octane : 28,8 % décaline : 8,8 %	$C_{9,33}H_{20,32}$ H/C : 2,18 CN : 54,4	P=10 bar τ=0,7 φ=1 T : 560-1110 K	- Amélioration de la réactivité du mélange - Amélioration de la formation de l'ensemble des produits principaux - Toujours surproduction d'isobutène mais diminution d'environ 1/4 - Légère sous-production d'acétylène
CTL 8040 (sasol)	n-paraffines : 5,7 % iso-paraffines : 36,3 % di-naphtènes : 28,3 % mononaphtènes : 16,1 % monoaromatiques : 4 % naphténoaromatiques : 9,6 %	$C_{11,06}H_{21,6}$ H/C : 1,95 CN : 32,7	P=10 bar τ=0,7 φ=1 T : 560-1110 K	
Carburants modèles				
Surrogate 0	n-décane : 43,1 % iso-octane : 11,4 % n-pch : 36,1 % n-pbz : 9,4 %	$C_{9,27}H_{18,97}$ H/C : 2,04 CN : 52,9	P=10 bar τ=0,7 φ=1 T : 560-1110 K	- Réactivité à basse température très supérieure au kérosène - Sous-production de méthane (~ 200 ppm) - Surproduction de 1-butène (~ 20 ppm) - Formation d'isobutène bien représenté
Surrogate 1	n-décane : 43,1 % iso-octane : 11,4 % n-pch : 12,1 % décaline : 24 % n-pbz : 9,4 %	$C_{9,5}H_{18,99}$ H/C : 1,99 CN : 52	P=10 bar τ=0,7 φ=1 T : 560-1110 K	- Réactivité à basse température très supérieure au kérosène mais légère diminution globale de la réactivité - Sous-production de méthane (~ 200 ppm) - Surproduction de 1-butène (~ 15 ppm) - Formation d'isobutène bien représenté
Surrogate 2	n-décane : 15 % iso-octane : 27 % n-pch : 16,1 % décaline : 28,3 % n-pbz : 13,6 %	$C_{9,09}H_{17,67}$ H/C : 1,94 CN : 36,2	P=10 bar τ=0,7 φ=1 T : 560-1110 K	- Amélioration de la réactivité du mélange - Sous-production de méthane (~ 150 ppm) - Légère sous-production de 1-butène (~ 5 ppm) - Surproduction à basse et haute température d'iso-butène (~ 70 ppm)

Annexe-III : Mécanisme cinétique

Les constantes de vitesse sont données sous la forme d'une loi d'Arrhénius modifiée :

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

Avec : A : Facteur préexponentiel [$cm^3.mol^{-1}.s^{-1}$]

T : température [K]

E : énergie d'activation [$cal.mol^{-1}$]

R : constante des gaz parfaits [$cal.K^{-1}.mol^{-1}$]

CHEMKIN INTERPRETER OUTPUT: CHEMKIN-II Version 3.9 Aug. 1994
DOUBLE PRECISION

ELEMENTS CONSIDERED	ATOMIC WEIGHT
1. c	12.0120
2. h	1.00797
3. o	15.9994
4. n	14.0067
5. ar	39.9500

	SPECIES CONSIDERED	PHASE	CHARGE	MOLECULAR WEIGHT	TEMPERATURE LOW	TEMPERATURE HIGH	ELEMENT COUNT c	h	o	n	ar
1.	co	G	0	28.01140	200	6000	1	0	1	0	0
2.	o2	G	0	31.99880	300	5000	0	0	2	0	0
3.	co2	G	0	44.01080	200	6000	1	0	2	0	0
4.	h2o	G	0	18.01534	200	6000	0	2	1	0	0
5.	ch4	G	0	16.04388	200	6000	1	4	0	0	0
6.	h2	G	0	2.01594	300	5000	0	2	0	0	0
7.	c2h2	G	0	26.03994	300	5000	2	2	0	0	0
8.	ch2o	G	0	30.02734	200	6000	1	2	1	0	0
9.	ch3hco	G	0	44.05528	200	6000	2	4	1	0	0
10.	ethco	G	0	58.08322	200	6000	3	6	1	0	0
11.	nc3h7hco	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
12.	acrol	G	0	56.06728	200	6000	3	4	1	0	0
13.	c2h4	G	0	28.05588	200	6000	2	4	0	0	0
14.	c3h6	G	0	42.08382	200	6000	3	6	0	0	0
15.	c4h8	G	0	56.11176	300	5000	4	8	0	0	0
16.	c4h6	G	0	54.09582	300	5000	4	6	0	0	0
17.	c2h6	G	0	30.07182	300	5000	2	6	0	0	0
18.	c3h8	G	0	44.09976	300	5000	3	8	0	0	0
19.	c4h10	G	0	58.12770	300	5000	4	10	0	0	0
20.	c5h10	G	0	70.13970	200	6000	5	10	0	0	0
21.	t2c4h8	G	0	56.11176	200	6000	4	8	0	0	0
22.	c2c4h8	G	0	56.11176	200	6000	4	8	0	0	0
23.	ic4h8	G	0	56.11176	300	5000	4	8	0	0	0
24.	c6h14	G	0	86.18358	300	5000	6	14	0	0	0
25.	c6h12-1	G	0	84.16764	200	6000	6	12	0	0	0
26.	c6h6	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
27.	toluen	G	0	92.14776	200	6000	7	8	0	0	0
28.	nc4h9hco	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
29.	c5h11hco	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
30.	nc5h12	G	0	72.15564	300	5000	5	12	0	0	0
31.	pbz	G	0	120.20364	300	3000	9	12	0	0	0
32.	pch	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
33.	nc10h22	G	0	142.29534	200	6000	10	22	0	0	0
34.	ic8h18	G	0	114.23946	298	5000	8	18	0	0	0
35.	styren	G	0	104.15976	300	5000	8	8	0	0	0
36.	h2o2	G	0	34.01474	200	6000	0	2	2	0	0
37.	pc3h4	G	0	40.06788	200	6000	3	4	0	0	0
38.	ac3h4	G	0	40.06788	200	6000	3	4	0	0	0
39.	butanone	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
40.	c2h4o	G	0	44.05528	300	5000	2	4	1	0	0
41.	ch3oh	G	0	32.04328	300	5000	1	4	1	0	0
42.	butyne	G	0	54.09582	200	6000	4	6	0	0	0
43.	butyn2	G	0	54.09582	200	6000	4	6	0	0	0
44.	CPD	G	0	66.10782	200	6000	5	6	0	0	0
45.	aceton	G	0	58.08322	200	6000	3	6	1	0	0
46.	ic3h5cho	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
47.	chxone	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
48.	chxe2oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
49.	chxe3oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
50.	cyc6h10	G	0	82.15170	300	5000	6	10	0	0	0
51.	che24one	G	0	94.11922	300	5000	6	6	1	0	0
52.	chxoqjB	G	0	129.14193	300	5000	6	9	3	0	0
53.	c2h5coc2h3	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
54.	mche1	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
55.	phc2h5	G	0	106.17570	300	3000	8	10	0	0	0
56.	c6h5oh	G	0	94.11922	300	4000	6	6	1	0	0
57.	phhco	G	0	106.13122	300	5000	7	6	1	0	0
58.	isope	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
59.	hxol	G	0	102.18298	300	5000	6	14	1	0	0
60.	decalin	G	0	138.26346	300	5000	10	18	0	0	0
61.	qdecooh	G	0	169.25429	300	5000	10	17	2	0	0
62.	odecal	G	0	138.26346	300	5000	10	18	0	0	0
63.	dcyc5	G	0	136.24752	300	5000	10	16	0	0	0
64.	tetralin	G	0	132.21564	300	5000	10	12	0	0	0
65.	indene	G	0	116.17176	300	5000	9	8	0	0	0
66.	xylene	G	0	106.17570	300	5000	8	10	0	0	0
67.	bzfur	G	0	118.14322	300	5000	8	6	1	0	0
68.	c7h16-3	G	0	100.21152	300	5000	7	16	0	0	0
69.	c8h18-3	G	0	114.23946	300	5000	8	18	0	0	0
70.	ac5h10	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
71.	lc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
72.	c6h12-2	G	0	84.16764	200	6000	6	12	0	0	0
73.	c7h14-5-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
74.	c7h14-1-2	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
75.	c8h16o3-6-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
76.	c8h16-1-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
77.	c8h16-2-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
78.	c8h16-3-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
79.	c8h16-4-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
80.	c8h16-5-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
81.	c8h16-z-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
82.	c8h16-6-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
83.	c7h14-2	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
84.	c7h14-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
85.	c8h18-2	G	0	114.23946	300	5000	8	18	0	0	0
86.	c8h16-1-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
87.	c8h16-2-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
88.	c8h16-3-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
89.	c8h16-4-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
90.	c8h16-5-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
91.	c8h16-6-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
92.	h	G	0	1.00797	300	5000	0	1	0	0	0
93.	o	G	0	15.99940	300	5000	0	0	1	0	0
94.	oh	G	0	17.00737	200	6000	0	1	1	0	0
95.	ho2	G	0	33.00677	200	5000	0	1	2	0	0
96.	n2	G	0	28.01340	300	5000	0	0	0	2	0
97.	ar	G	0	39.95000	300	5000	0	0	0	0	1
98.	ch3	G	0	15.03591	200	6000	1	3	0	0	0
99.	ch2	G	0	14.02794	200	6000	1	2	0	0	0
100.	sch2	G	0	14.02794	200	6000	1	2	0	0	0
101.	ch	G	0	13.01997	300	5000	1	1	0	0	0
102.	C	G	0	12.01200	300	5000	1	0	0	0	0
103.	ch3o	G	0	31.03531	300	5000	1	3	1	0	0
104.	ch2oh	G	0	31.03531	250	3000	1	3	1	0	0
105.	hco	G	0	29.01937	200	6000	1	1	1	0	0
106.	ch3o2	G	0	47.03471	300	5000	1	3	2	0	0
107.	ch3o2h	G	0	48.04268	300	5000	1	4	2	0	0
108.	ocho	G	0	45.01877	300	5000	1	1	2	0	0
109.	hocho	G	0	46.02674	300	5000	1	2	2	0	0
110.	hoch2o	G	0	47.03471	300	5000	1	3	2	0	0
111.	c2h5	G	0	29.06385	200	6000	2	5	0	0	0
112.	c2h3	G	0	27.04791	200	3500	2	3	0	0	0
113.	c2h	G	0	25.03197	200	6000	2	1	0	0	0
114.	c2	G	0	24.02400	300	5000	2	0	0	0	0
115.	c2o	G	0	40.02340	300	5000	2	0	1	0	0
116.	ch3co	G	0	43.04731	200	6000	2	3	1	0	0
117.	ch2hco	G	0	43.04731	300	5000	2	3	1	0	0
118.	ch2co	G	0	42.03934	200	6000	2	2	1	0	0
119.	hcco	G	0	41.03137	300	5000	2	1	1	0	0
120.	ch3co2	G	0	59.04671	300	5000	2	3	2	0	0
121.	ch3co3	G	0	75.04611	300	5000	2	3	3	0	0
122.	ch3co3h	G	0	76.05408	300	5000	2	4	3	0	0
123.	c2h5oh	G	0	46.07122	300	5000	2	6	1	0	0
124.	c2h5o	G	0	45.06325	300	5000	2	5	1	0	0
125.	c2h5o2	G	0	61.06265	200	6000	2	5	2	0	0
126.	c2h5o2h	G	0	62.07062	300	5000	2	6	2	0	0
127.	c2h4o2h	G	0	61.06265	300	5000	2	5	2	0	0
128.	c2h2oh	G	0	43.04731	300	5000	2	3	1	0	0
129.	hccoh	G	0	42.03934	300	4000	2	2	1	0	0
130.	chocho	G	0	58.03874	300	5000	2	2	2	0	0
131.	choco	G	0	57.03077	300	5000	2	1	2	0	0
132.	c2h3o	G	0	43.04731	300	5000	2	3	1	0	0
133.	pc2h4oh	G	0	45.06325	200	6000	2	5	1	0	0
134.	o2c2h4oh	G	0	77.06205	300	5000	2	5	3	0	0
135.	ch3choh	G	0	45.06325	300	5000	2	5	1	0	0
136.	nc3h7	G	0	43.09179	200	6000	3	7	0	0	0
137.	ic3h7	G	0	43.09179	200	6000	3	7	0	0	0
138.	ac3h5	G	0	41.07585	300	5000	3	5	0	0	0
139.	tc3h5	G	0	41.07585	300	5000	3	5	0	0	0
140.	sc3h5	G	0	41.07585	300	5000	3	5	0	0	0
141.	c3h3	G	0	39.05991	200	6000	3	3	0	0	0
142.	c3h2	G	0	38.05194	300	5000	3	2	0	0	0
143.	nc3h7o	G	0	59.09119	300	5000	3	7	1	0	0
144.	nc3h7oh	G	0	60.09916	300	3000	3	8	1	0	0
145.	ic3h7o	G	0	59.09119	300	5000	3	7	1	0	0
146.	c3h6o	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
147.	c3h6o1-3	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
148.	c3h5o	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
149.	c3h4oh	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
150.	c3h4o2h	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
151.	c3h4o	G	0	56.06728	300	5000	3	4	1	0	0
152.	c3h3o	G	0	55.05931	300	5000	3	3	1	0	0
153.	c2h5co	G	0	57.07525	200	6000	3	5	1	0	0
154.	ch3chcho	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
155.	c2h3co	G	0	55.05931	200	6000	3	3	1	0	0
156.	ch2coch3	G	0	57.07525	200	6000	3	5	1	0	0
157.	c3h6oh	G	0	59.09119	300	3000	3	7	1	0	0
158.	c3h6oh	G	0	59.09119	300	3000	3	7	1	0	0
159.	c3h6oh2oo	G	0	91.08999	300	3000	3	7	3	0	0
160.	c3h6oh1oo	G	0	91.08999	300	3000	3	7	3	0	0
161.	ch3chco	G	0	56.06728	300	5000	3	4	1	0	0
162.	ch2ch2hco	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
163.	o2c2h4hco	G	0	89.07405	300	5000	3	5	3	0	0
164.	ho2c2h4co	G	0	89.07405	300	5000	3	5	3	0	0
165.	ho2c2h4hco	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
166.	oc2h4hco	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
167.	ch3cocho	G	0	72.06668	300	5000	3	4	2	0	0
168.	ch3coco	G	0	71.05871	300	5000	3	3	2	0	0
169.	ch2cohco	G	0	71.05871	300	5000	3	3	2	0	0
170.	hcoch2hco	G	0	72.06668	300	5000	3	4	2	0	0
171.	hcoch2co	G	0	71.05871	300	5000	3	3	2	0	0
172.	ch3coch2o2	G	0	89.07405	300	5000	3	5	3	0	0
173.	ch3coch2o	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
174.	hccco	G	0	53.04337	300	4000	3	1	1	0	0
175.	propynal	G	0	54.05134	300	5000	3	2	1	0	0
176.	c3h5-aoo	G	0	73.07465	300	3000	3	5	2	0	0
177.	c3h5-aooh	G	0	74.08262	300	3000	3	6	2	0	0
178.	ic4h9	G	0	57.11973	200	6000	4	9	0	0	0
179.	tc4h9	G	0	57.11973	200	6000	4	9	0	0	0
180.	ic4h7	G	0	55.10379	200	6000	4	7	0	0	0
181.	c3h4hco	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
182.	c3h3hco	G	0	68.07928	300	5000	4	4	1	0	0
183.	pc4h9	G	0	57.11973	300	5000	4	9	0	0	0
184.	sc4h9	G	0	57.11973	300	5000	4	9	0	0	0
185.	Ac4h7-1	G	0	55.10379	200	6000	4	7	0	0	0
186.	Cc4h7-1	G	0	55.10379	200	6000	4	7	0	0	0
187.	Dc4h7-1	G	0	55.10379	200	6000	4	7	0	0	0
188.	meall	G	0	54.09582	300	3000	4	6	0	0	0
189.	ic4h5	G	0	53.08785	200	6000	4	5	0	0	0
190.	nc4h5	G	0	53.08785	200	6000	4	5	0	0	0
191.	c4h4	G	0	52.07988	300	4000	4	4	0	0	0
192.	nc4h3	G	0	51.07191	200	6000	4	3	0	0	0
193.	ic4h3	G	0	51.07191	200	6000	4	3	0	0	0
194.	c4h2	G	0	50.06394	200	6000	4	2	0	0	0
195.	c3h7co	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
196.	c4h7oh	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
197.	ac3h5hco	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
198.	ac3h5co	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
199.	c2h3chcho	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
200.	mvk	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
201.	ch2coc2h3	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
202.	mhd	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
203.	h2c4o	G	0	66.06334	300	5000	4	2	1	0	0
204.	c4h6o2h	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
205.	hoc4h6	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
206.	ch3chch2hco	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
207.	c3h6cho-1	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0

208. ch3coc2h4p	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
209. ch3coc2h4o2	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
210. ch3coc2h4o2h	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
211. ch3coc2h4o	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
212. c2h5coch2	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
213. c2h5coch2o2	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
214. c2h5coch2o2h	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
215. c2h5coch2o	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
216. c4h7hco-1	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
217. c4h7co-1	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
218. c4h8hco-2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
219. c4h7hco-2	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
220. c4h7co-2	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
221. c4h722	G	0	55.10379	200	6000	4	7	0	0	0
222. c4h712	G	0	55.10379	200	6000	4	7	0	0	0
223. c4h5-2	G	0	53.08785	200	6000	4	5	0	0	0
224. c4h6o25	G	0	70.09522	200	5000	4	6	1	0	0
225. c4h612	G	0	54.09582	200	6000	4	6	0	0	0
226. c2h3chcoh2	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
227. c4h6o23	G	0	70.09522	200	5000	4	6	1	0	0
228. c4h4o	G	0	68.07928	200	6000	4	4	1	0	0
229. c4h5o	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
230. sc3h5cho	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
231. sc4h9oh	G	0	74.12710	300	4000	4	10	1	0	0
232. sc4h9o	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
233. c3h6cho-2	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
234. c3h6cho-3	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
235. c3h6cho-4	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
236. c2h5chco	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
237. c3h6cho-4o2	G	0	103.10199	300	4000	4	7	3	0	0
238. but4ooh1*o	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
239. c3h6cho-4o	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
240. choc2h4cho	G	0	86.09462	300	5000	4	6	2	0	0
241. choc2h4co	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
242. pc4h8oh-2	G	0	73.11913	300	3000	4	9	1	0	0
243. sc4h8oh-1	G	0	73.11913	300	3000	4	9	1	0	0
244. sc4h8oh-3	G	0	73.11913	300	3000	4	9	1	0	0
245. pc4h8oh-2oo	G	0	105.11793	300	3000	4	9	3	0	0
246. sc4h8oh-1oo	G	0	105.11793	300	3000	4	9	3	0	0
247. sc4h8oh-3oo	G	0	105.11793	300	3000	4	9	3	0	0
248. c4h91o2	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
249. c4h92o2	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
250. c4h81ooh2j	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
251. c4h81ooh3j	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
252. c4h81ooh4j	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
253. c4h82ooh1j	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
254. c4h82ooh3j	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
255. c4h82ooh4j	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
256. but1ooh2o2	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
257. but1ooh3o2	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
258. but1ooh4o2	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
259. but2ooh1o2	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
260. but2ooh3o2	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
261. but2ooh4o2	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
262. but1ooh2*o	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
263. but2ooh1*o	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
264. but4ooh2*o	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
265. but3ooh1*o	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
266. but3ooh2*o	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
267. c4h8cy1o2	G	0	72.11116	300	4000	4	8	1	0	0
268. c4h8cy1o3	G	0	72.11116	300	4000	4	8	1	0	0
269. c4h8cy1o4	G	0	72.11116	300	4000	4	8	1	0	0
270. c3h6cho-3o2	G	0	103.10199	300	4000	4	7	3	0	0
271. c4h8cy2o3	G	0	72.11116	300	4000	4	8	1	0	0
272. c4h91o2h	G	0	90.12650	300	5000	4	10	2	0	0
273. pc4h9o	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
274. c4h92o2h	G	0	90.12650	300	5000	4	10	2	0	0
275. c4h73o2	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
276. c4h71o2	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
277. c4h63ooh4j	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
278. c4h61ooh4j	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
279. c4h63ooh4o2	G	0	119.10139	300	4000	4	7	4	0	0
280. c4h61ooh4o2	G	0	119.10139	300	4000	4	7	4	0	0
281. c4h54o2h3*o	G	0	102.09402	300	4000	4	6	3	0	0
282. c4h54o2h1*o	G	0	102.09402	300	4000	4	6	3	0	0
283. tc3h6cho	G	0	71.10319	300	3000	4	7	1	0	0
284. ic3h6co	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
285. ic3h7cho	G	0	72.11116	300	3000	4	8	1	0	0
286. ic3h7co	G	0	71.10319	300	3000	4	7	1	0	0
287. ic3h6cho	G	0	71.10319	300	3000	4	7	1	0	0
288. ic3h5co	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
289. c3h5oh	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
290. ch2cch2oh	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
291. ch3chcoch3	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
292. c43oo2*o	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
293. c4j3ooh2*o	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
294. ch3chocho	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
295. ch3ccch2	G	0	53.08785	200	6000	4	5	0	0	0
296. ch3chcch	G	0	53.08785	200	6000	4	5	0	0	0
297. h2ccccch2	G	0	52.07988	300	5000	4	4	0	0	0
298. ic4h9o2	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
299. ic4h9o2h	G	0	90.12650	300	5000	4	10	2	0	0
300. ic4h9o	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
301. ic4h8io2h	G	0	89.11853	300	4000	4	9	2	0	0
302. tc4h8io2h	G	0	89.11853	300	4000	4	9	2	0	0
303. o2ic4h8io2h	G	0	121.11733	300	4000	4	9	4	0	0
304. o2tc4h8io2h	G	0	121.11733	300	4000	4	9	4	0	0
305. ho2ic4h7io	G	0	104.10996	300	4000	4	8	3	0	0
306. ho2tc4h7io	G	0	104.10996	300	4000	4	8	3	0	0
307. ic4h7v	G	0	55.10379	300	5000	4	7	0	0	0
308. ic4h8to2h	G	0	89.11853	300	4000	4	9	2	0	0
309. ic4h7oh	G	0	72.11116	200	6000	4	8	1	0	0
310. ic4h7o	G	0	71.10319	200	6000	4	7	1	0	0
311. ic4h6oh	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
312. c3h6cho-3o	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
313. ch2chchco	G	0	68.07928	300	5000	4	4	1	0	0
314. cjhchchco	G	0	67.07131	300	5000	4	3	1	0	0
315. c4ald3oxo	G	0	86.09462	300	5000	4	6	2	0	0
316. mecomeco	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
317. c2h5coco	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
318. c3h6cho-2o2	G	0	103.10199	300	4000	4	7	3	0	0
319. c3h6cho-2o	G	0	87.10259	300	4000	4	7	2	0	0
320. c4ald2oxo	G	0	86.09462	200	6000	4	6	2	0	0
321. ic4h10	G	0	58.12770	300	5000	4	10	0	0	0
322. ic4h8o	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
323. ic4h8oh	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
324. acetoch2o2	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
325. acetoch2o	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
326. Ac5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
327. Bc5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
328. Cc5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
329. c2c5h10	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
330. t2c5h10	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
331. Ac5h9-1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
332. Cc5h9-1	G	0	69.13173	200	6000	5	9	0	0	0
333. Dc5h9-1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
334. Ec5h9-1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
335. Dc5h9-2	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
336. nc4h9co	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
337. c3h7coch3	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
338. c5h8-12	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
339. c5h8-13	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
340. c5h8-14	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
341. c5h7	G	0	67.11579	300	5000	5	7	0	0	0
342. ch3coc3h6o2-1	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
343. ch3coc3h6o2h-1	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
344. ch3coc3h6o-1	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
345. isoph	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
346. isopy	G	0	67.11579	300	5000	5	7	0	0	0
347. Ac6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
348. Bc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
349. Cc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
350. c6h12-3	G	0	84.16764	200	6000	6	12	0	0	0
351. Cc6h11-1	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
352. Fc6h11-1	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
353. Ac6h11-3	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
354. Bc6h11-3	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
355. c6h10-13	G	0	82.15170	200	6000	6	10	0	0	0
356. c6h10-15	G	0	82.15170	300	5000	6	10	0	0	0
357. c6h9	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
358. c5h11co	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
359. Dc6h11-1	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
360. Ec6h11-1	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
361. nc7h16	G	0	100.21152	300	5000	7	16	0	0	0
362. Ac7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
363. Bc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
364. Cc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
365. Dc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
366. c7h14-1	G	0	98.19558	200	6000	7	14	0	0	0
367. c7h12-13	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
368. c7h12-16	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
369. Cc7h13-1	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
370. Dc7h13-2	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
371. Ec7h13-3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
372. Dc7h13-1	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
373. Ac7h13-3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
374. c6h13hco	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
375. c6h13co	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
376. c7h14rohAB	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
377. c7h14qjohAB	G	0	147.20175	300	5000	7	15	3	0	0
378. c7h14rohBC	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
379. c7h14qjohBC	G	0	147.20175	300	5000	7	15	3	0	0
380. c7h14rohCD	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
381. c7h14qjohCD	G	0	147.20175	300	5000	7	15	3	0	0
382. p2c4h614	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
383. p2c4h513	G	0	96.17964	300	3000	7	12	0	0	0
384. P2c4h4134	G	0	95.17167	300	3000	7	11	0	0	0
385. nc8h18	G	0	114.23946	200	6000	8	18	0	0	0
386. Ac8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
387. Bc8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
388. Cc8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
389. Dc8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
390. c8h16-1	G	0	112.22352	200	6000	8	16	0	0	0
391. c8h16-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
392. c8h16-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
393. c8h16-4	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
394. Cc8h15-1	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
395. Hc8h15-1	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
396. Dc8h15-2	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
397. Ec8h15-3	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
398. c8h14	G	0	110.20758	300	5000	8	14	0	0	0
399. c8h16rohAB	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
400. c8h16rohBC	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
401. c8h16rohCD	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
402. c8h16rohDE	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
403. c8h16qjohAB	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
404. c8h16qjohBC	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
405. c8h16qjohCD	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
406. c8h16qjohDE	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
407. c7h15hco	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
408. c7h15co	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
409. nc9h20	G	0	128.26740	200	6000	9	20	0	0	0
410. Ac9h19	G	0	127.25943	200	6000	9	19	0	0	0
411. Bc9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
412. Cc9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
413. Dc9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
414. Ec9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
415. c9h18-1	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
416. c9h18-2	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
417. c9h18-3	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
418. c9h18-4	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
419. Cc9h17-1	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
420. Dc9h17-2	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
421. Ec9h17-3	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
422. Fc9h17-4	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
423. c9h16	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
424. c8h17hco	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
425. c8h17co	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
426. Ac10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
427. Bc10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
428. Cc10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
429. Dc10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
430. Ec10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
431. c10h20-1	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
432. c10h20-2	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
433. c10h20-3	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
434. c10h20-4	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
435. c10h20-5	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0

436. Cc10h19-1	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
437. Dc10h19-2	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
438. Ec10h19-3	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
439. Fc10h19-4	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
440. c10h20rohAB	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
441. c10h20qjohAB	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
442. c10h20rohBC	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
443. c10h20qjohBC	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
444. c10h20rohCD	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
445. c10h20qjohCD	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
446. c10h20rohDE	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
447. c10h20qjohDE	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
448. c10h20rohEF	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
449. c10h20qjohEF	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
450. cyc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
451. cyc6h11	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
452. cyc6h9	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
453. Bchxone	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
454. Cchxone	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
455. Dchxone	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
456. Dchxe2oA	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
457. Fc6e1oC	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
458. c6e5oA	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
459. c6e5oyA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
460. Ac6e5oC	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
461. Ac6e5oB	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
462. Ac6e3e5oB	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
463. mch	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
464. mchA	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
465. mchB	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
466. Amche1	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
467. Cmche1	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
468. Dmche1	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
469. BmchohA	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
470. mchohAqjB	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
471. mche13	G	0	94.16370	300	5000	7	10	0	0	0
472. mche14	G	0	94.16370	300	5000	7	10	0	0	0
473. Emche13	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
474. Gmche13	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
475. Fmche14	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
476. Gmche14	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
477. mche135	G	0	92.14776	300	5000	7	8	0	0	0
478. mche136	G	0	92.14776	300	5000	7	8	0	0	0
479. mche1oC	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
480. mchoA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
481. mche2oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
482. chxco	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
483. mchoAoC	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
484. mchoyAoC	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
485. mchoAoD	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
486. mchoyAoD	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
487. AmchoD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
488. AmchoC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
489. Gc7h13-1	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
490. c7e6oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
491. Gc7e1oC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
492. Ec5e1oC	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
493. Ac7e6oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
494. Gc7e1oD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
495. Ac5e4oB	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
496. Gc7e1oF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
497. c6h7C	G	0	79.12779	300	5000	6	7	0	0	0
498. Lc6h7	G	0	79.12779	300	5000	6	7	0	0	0
499. Lc6h6	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
500. Lc6h4	G	0	76.10388	300	5000	6	4	0	0	0
501. U-c6h5	G	0	77.11185	300	5000	6	5	0	0	0
502. chxe1rD	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
503. chd13	G	0	80.13576	300	5000	6	8	0	0	0
504. chd14	G	0	80.13576	300	5000	6	8	0	0	0
505. cyc6h9o	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
506. Fc6e3oAoE	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
507. Dc6e5oAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
508. Fc6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
509. Fc6e2oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
510. Fc6h9-13	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
511. hex135	G	0	80.13576	300	5000	6	8	0	0	0
512. sc3h5co	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
513. Ac6h9-15	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
514. c5h5	G	0	65.09985	200	6000	5	5	0	0	0
515. c5h4oh	G	0	81.09925	200	6000	5	5	1	0	0
516. c5h5o	G	0	81.09925	300	3000	5	5	1	0	0
517. c5h4o	G	0	80.09128	200	6000	5	4	1	0	0
518. cyc5h7	G	0	67.11579	300	5000	5	7	0	0	0
519. cyc5h8	G	0	68.12376	200	5000	5	8	0	0	0
520. rdecalin	G	0	137.25549	300	5000	10	17	0	0	0
521. rdecoo	G	0	169.25429	300	5000	10	17	2	0	0
522. rodeca	G	0	137.25549	300	5000	10	17	0	0	0
523. khdeca	G	0	184.24572	300	5000	10	16	3	0	0
524. rcresolo	G	0	107.13919	300	5000	7	7	1	0	0
525. rtetralin	G	0	131.20767	300	5000	10	11	0	0	0
526. rtetraoo	G	0	163.20647	300	5000	10	11	2	0	0
527. rxylene	G	0	105.16773	300	5000	8	9	0	0	0
528. c6h4ch3	G	0	91.13979	300	5000	7	7	0	0	0
529. indenyl	G	0	115.16379	300	3000	9	7	0	0	0
530. zdeca	G	0	201.25309	300	5000	10	17	4	0	0
531. hex1245	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
532. c6h615	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
533. mc6h6	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
534. fulvene	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
535. c6h5	G	0	77.11185	300	5000	6	5	0	0	0
536. c6h5o	G	0	93.11125	300	4000	6	5	1	0	0
537. c6h4o2	G	0	108.10268	300	5000	6	4	2	0	0
538. c6h5o2	G	0	109.11065	200	6000	6	5	2	0	0
539. c6h5o2h	G	0	110.11862	200	6000	6	6	2	0	0
540. c6h3o2	G	0	107.09471	300	5000	6	3	2	0	0
541. c6h3o3	G	0	123.09411	300	5000	6	3	3	0	0
542. c5h4	G	0	64.09188	300	5000	5	4	0	0	0
543. phch2	G	0	91.13979	200	6000	7	7	0	0	0
544. phch2oh	G	0	108.14716	300	5000	7	8	1	0	0
545. phch2o	G	0	107.13919	300	3000	7	7	1	0	0
546. phco	G	0	105.12325	300	5000	7	5	1	0	0
547. Aphc2h4	G	0	105.16773	300	3000	8	9	0	0	0
548. Bphc2h4	G	0	105.16773	300	3000	8	9	0	0	0
549. ASTYRYL	G	0	103.15179	300	5000	8	7	0	0	0
550. BSTYRYL	G	0	103.15179	300	5000	8	7	0	0	0
551. phc2h	G	0	102.14382	300	3000	8	6	0	0	0
552. c6h4c2h3	G	0	103.15179	300	5000	8	7	0	0	0
553. phch2hco	G	0	120.15916	300	5000	8	8	1	0	0
554. phch2co	G	0	119.15119	300	5000	8	7	1	0	0
555. phcoch2	G	0	119.15119	300	5000	8	7	1	0	0
556. c6h5cco	G	0	117.13525	300	5000	8	5	1	0	0
557. pbzjA	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
558. pbzjB	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
559. pbzjC	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
560. BPHPROPY	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
561. phc3h5-1	G	0	118.18770	300	5000	9	10	0	0	0
562. phc3h5-2	G	0	118.18770	300	5000	9	10	0	0	0
563. phc3h4	G	0	117.17973	300	5000	9	9	0	0	0
564. phcoc2h3	G	0	132.17116	300	5000	9	8	1	0	0
565. phc2h4hco	G	0	134.18710	300	5000	9	10	1	0	0
566. phc2h4co	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
567. phch2coch2	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
568. phcoc2h4	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
569. Bphc3h5ohA	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
570. Aphc3h5ohB	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
571. Cphc3h5ohB	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
572. Bphc3h5ohC	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
573. pbzohAqjB	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
574. pbzohBqjA	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
575. pbzohBqjC	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
576. pbzohCqjB	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
577. Cophc3h4-1	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
578. Aophc3h4-2	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
579. c14h14	G	0	182.27958	300	3000	14	14	0	0	0
580. napht	G	0	128.18376	300	5000	10	8	0	0	0
581. c10h9	G	0	129.19173	200	6000	10	9	0	0	0
582. c10h10	G	0	130.19970	200	6000	10	10	0	0	0
583. c6h4c2h	G	0	101.13585	300	3000	8	5	0	0	0
584. A1c2hAC	G	0	127.17579	300	5000	10	7	0	0	0
585. A2-X	G	0	127.17579	300	5000	10	7	0	0	0
586. A2O	G	0	143.17519	300	5000	10	7	1	0	0
587. A2oh	G	0	144.18316	300	5000	10	8	1	0	0
588. A1c2h3AC	G	0	129.19173	200	6000	10	9	0	0	0
589. pchA	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
590. pchB	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
591. pchC	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
592. pchD	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
593. pchE	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
594. pchF	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
595. pchG	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
596. pchqjA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
597. pchqjB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
598. pchqjC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
599. pchqjD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
600. pchqjE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
601. pchqjF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
602. pchqjG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
603. pchqA	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
604. pchqB	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
605. pchqC	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
606. pchqD	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
607. pchqE	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
608. pchqF	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
609. pchqG	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
610. pchojA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
611. pchojB	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
612. pchojC	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
613. pchojD	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
614. pchojE	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
615. pchojF	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
616. pchojG	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
617. ApchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
618. BpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
619. CpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
620. DpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
621. EpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
622. FpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
623. GpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
624. ApchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
625. BpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
626. CpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
627. DpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
628. EpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
629. FpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
630. GpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
631. ApchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
632. BpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
633. CpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
634. DpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
635. EpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
636. FpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
637. GpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
638. ApchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
639. BpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
640. CpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
641. EpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
642. FpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
643. GpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
644. ApchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
645. BpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
646. CpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
647. DpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
648. EpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
649. FpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
650. GpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
651. HpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
652. ApchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
653. BpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
654. CpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
655. DpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
656. EpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
657. FpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
658. GpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
659. ApchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
660. BpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
661. CpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
662. DpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
663. EpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0

664. FpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
665. GpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
666. IpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
667. HpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
668. IpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
669. pchqAqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
670. pchqAqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
671. pchqAqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
672. pchqAqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
673. pchqAqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
674. pchqAqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
675. pchqBqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
676. pchqBqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
677. pchqBqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
678. pchqBqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
679. pchqBqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
680. pchqBqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
681. pchqCqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
682. pchqCqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
683. pchqCqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
684. pchqCqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
685. pchqCqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
686. pchqCqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
687. pchqDqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
688. pchqDqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
689. pchqDqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
690. pchqDqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
691. pchqDqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
692. pchqDqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
693. pchqEqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
694. pchqEqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
695. pchqEqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
696. pchqEqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
697. pchqEqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
698. pchqEqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
699. pchqEqjH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
700. pchqEqjI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
701. pchqFqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
702. pchqFqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
703. pchqFqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
704. pchqFqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
705. pchqFqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
706. pchqFqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
707. pchqFqjH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
708. pchqFqjI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
709. pchqGqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
710. pchqGqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
711. pchqGqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
712. pchqGqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
713. pchqGqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
714. pchqGqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
715. pchoAqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
716. pchoAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
717. pchoAqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
718. pchoBqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
719. pchoBqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
720. pchoBqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
721. pchoBqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
722. pchoCqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
723. pchoCqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
724. pchoCqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
725. pchoCqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
726. pchoCqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
727. pchoEqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
728. pchoEqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
729. pchoEqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
730. pchoEqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
731. pchoEqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
732. pchoEqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
733. pchoEqH	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
734. pchoEqI	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
735. pchoFqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
736. pchoFqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
737. pchoFqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
738. pchoFqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
739. pchoFqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
740. pchoFqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
741. pchoFqH	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
742. pchoFqI	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
743. pchoGqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
744. pchoGqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
745. pchoGqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
746. pchoAojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
747. pchoAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
748. pchoAojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
749. pchoBojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
750. pchoBojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
751. pchoBojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
752. pchoBojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
753. pchoCojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
754. pchoCojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
755. pchoCojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
756. pchoCojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
757. pchoCojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
758. pchoBojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
759. pchoBojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
760. pchoBojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
761. pchoBojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
762. pchoBojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
763. pchoBojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
764. pchoBojH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
765. pchoBojI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
766. pchoFojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
767. pchoFojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
768. pchoFojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
769. pchoFojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
770. pchoFojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
771. pchoFojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
772. pchoFojH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
773. pchoFojI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
774. pchoGojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
775. pchoGojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
776. pchoGojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
777. ApchohB	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
778. BpchohA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
779. BpchohC	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
780. CpchohB	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
781. CpchohD	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
782. DpchohC	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
783. DpchohE	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
784. EpchohD	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
785. EpchohF	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
786. FpchohE	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
787. FpchohG	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
788. GpchohF	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
789. pcho-AB	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
790. pcho-BC	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
791. pcho-CD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
792. pcho-DE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
793. pcho-EF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
794. pcho-FG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
795. pcho-AC	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
796. pcho-AD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
797. pcho-AE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
798. pcho-AF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
799. pcho-BD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
800. pcho-BE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
801. pcho-BF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
802. pcho-BG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
803. pcho-CE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
804. pcho-CF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
805. pcho-CG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
806. pcho-DF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
807. pcho-DG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
808. pcho-EG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
809. pcho-EI	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
810. pcho-FH	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
811. pcho-EH	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
812. ApchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
813. BpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
814. ApchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
815. CpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
816. DpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
817. ApchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
818. EpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
819. ApchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
820. FpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
821. BpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
822. CpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
823. DpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
824. EpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
825. BpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
826. BpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
827. FpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
828. BpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
829. GpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
830. DpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
831. CpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
832. EpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
833. CpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
834. FpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
835. CpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
836. GpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
837. DpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
838. DpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
839. DpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
840. EpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
841. FpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
842. EpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
843. GpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
844. EpchoH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
845. HpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
846. IpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
847. FpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
848. GpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
849. HpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
850. pche1	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
851. pche2	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
852. pche3	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
853. pche4	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
854. pche5	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
855. pche6	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
856. Apche2	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
857. Dpche2	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
858. Cpche4	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
859. Dpche5	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
860. Epche6	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
861. Fpche7	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
862. pche2ojA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
863. pche1ojC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
864. pche2ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
865. pche3ojB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
866. pche4ojC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
867. pche3ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
868. pche4ojF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
869. pche6ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
870. pche5ojG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
871. pche7ojF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
872. Ao2pchohB	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
873. Bo2pchohA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
874. Bo2pchohC	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
875. Co2pchohB	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
876. Co2pchohD	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
877. Do2pchohC	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
878. Do2pchohE	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
879. Eo2pchohD	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
880. Eo2pchohF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
881. Fo2pchohE	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
882. Fo2pchohG	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
883. Go2pchohF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
884. pche1e3	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
885. pche2e4	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
886. pche3e5	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
887. pche4e6	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
888. pche5e7	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
889. pchoA	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
890. pchoB	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
891. pchoC	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0

892. pchoE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
893. pchoF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
894. pchoG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
895. DpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
896. FpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
897. GpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
898. IpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
899. DpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
900. FpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
901. GpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
902. HpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
903. IpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
904. DpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
905. EpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
906. GpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
907. HpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
908. IpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
909. ApchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
910. BpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
911. CpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
912. GpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
913. HpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
914. BpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
915. CpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
916. DpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
917. FpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
918. HpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
919. IpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
920. BpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
921. CpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
922. DpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
923. FpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
924. GpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
925. IpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
926. BpchqEqI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
927. CpchqEqI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
928. GpchqEqI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
929. CpchqFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
930. DpchqFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
931. EpchqFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
932. Fc9oAoG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
933. Fc9oAoH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
934. Fc9oAoE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
935. MeEc8oDoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
936. c9oyAoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
937. EtDc7oAoCrI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
938. EtDc7oAoHrI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
939. EtDc7oCoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
940. Ac9oDoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
941. Fc9oAoD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
942. EtDc7oBoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
943. Ac9oCoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
944. Fc9oAoC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
945. c9oAoGqjF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
946. Hc9oAoGqF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
947. c9oAoGqFqjH	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
948. c9oAoGoFqH	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0

949. c7oyAoBoG	G	0	141.15393	300	5000	7	9	3	0	0
950. c6oyAoF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
951. Ec5oA	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
952. c5oAqjE	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
953. Cc5oAqE	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
954. Bc5oAqE	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
955. c5oAqEqjC	G	0	149.12873	300	5000	5	9	5	0	0
956. c5oAqEqjB	G	0	149.12873	300	5000	5	9	5	0	0
957. c5oAoEqC	G	0	132.12136	300	5000	5	8	4	0	0
958. c5oAoEqB	G	0	132.12136	300	5000	5	8	4	0	0
959. Ac7oBoG	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
960. c7oBoGqjA	G	0	159.16927	300	5000	7	11	4	0	0
961. Cc7oBoGqA	G	0	159.16927	300	5000	7	11	4	0	0
962. Dc7oBoGqA	G	0	159.16927	300	5000	7	11	4	0	0
963. c7oBoGqAqjC	G	0	191.16807	300	5000	7	11	6	0	0
964. c7oBoGqAqjD	G	0	191.16807	300	5000	7	11	6	0	0
965. c7oAoBoGqC	G	0	174.16070	300	5000	7	10	5	0	0
966. c7oAoBoGqD	G	0	174.16070	300	5000	7	10	5	0	0
967. Cc6oAoD	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
968. MeCc6oAoDoG	G	0	142.16190	300	5000	7	10	3	0	0
969. MeCc6oyAoDoG	G	0	141.15393	300	5000	7	9	3	0	0
970. MeCc6oAoDoyG	G	0	141.15393	300	5000	7	9	3	0	0
971. c6oAoCoF	G	0	128.13396	300	5000	6	8	3	0	0
972. c6oyAoCoF	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
973. c6oAoCoyF	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
974. Ec5oAoD	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
975. Ec5oAoC	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
976. MeBc5oAoCrF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
977. c9oAoCqjF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
978. Dc9oAoCqF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
979. c9oAoCqFqjD	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
980. c9oAoCoFqD	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
981. c6oAoC	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
982. c6oyAoC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
983. MeBc5oAoF	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
984. MeBc5oyAoF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
985. c9oDoFqjA	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
986. Cc9oDoFqA	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
987. c9oDoFqAqjC	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
988. c9oAoDoFqC	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
989. EtDc7oArI	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
990. EtDc7oAqjI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
991. DEtDc7oAqI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
992. EtDc7oAqIqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
993. EtDc7oAoIqD	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
994. c7oAoD	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
995. c7oyAoD	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
996. EtDc7oIrA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
997. EtDc7oIqjA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
998. CEtDc7oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
999. DEtDc7oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1000. EtDc7oIqAqjC	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1001. EtDc7oIqAqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1002. EtDc7oAoIqC	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
1003. MeEc8oArI	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
1004. MeEc8oAqjI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1005. DMeEc8oAqI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0

1006. FMeEc8oAqI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1007. MeEc8oAqIqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1008. MeEc8oAqIqjF	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1009. MeEc8oAoIqD	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
1010. MeEc8oAoIqF	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
1011. MeCc6oAoG	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1012. MeCc6oyAoG	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1013. MeCc6oAoyG	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1014. Bc6oAoF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1015. MeEc8oIrA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
1016. Fc9oA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
1017. MeEc8oIqjA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1018. CMeEc8oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1019. DMeEc8oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1020. MeEc8oIqAqjC	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1021. MeEc8oIqAqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1022. MeEc8oAoIqC	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
1023. c9oAqjF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1024. Cc9oAqF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1025. Dc9oAqF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1026. Hc9oAqF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1027. c9oAqFqjC	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1028. c9oAqFqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1029. c9oAqFqjH	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
1030. c9oAoFqC	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
1031. c9oAoFqD	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
1032. c9oAoFqH	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
1033. MeBc5oArF	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1034. c7e6oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1035. Ec7e6oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1036. c5e4oB	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1037. Cc5e4oB	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1038. c7e6oAoE	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1039. c7e6oyAoE	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1040. Dc7oA	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
1041. c7e3oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1042. c7e4oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1043. Cc5e4oA	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1044. c6e5oAo4	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
1045. c6e5oyAo4	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1046. c5e4oAoC	G	0	98.10662	300	5000	5	6	2	0	0
1047. c5e4oyAoC	G	0	97.09865	300	5000	5	5	2	0	0
1048. c6alCco	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1049. MeCc6oBoGrA	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1050. c7e6oAoD	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1051. c7e6oyAoD	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1052. c6e5oAoC	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
1053. c6e5oyAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1054. Ac6oC	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1055. Bc5oA	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1056. ch2coch2hco	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
1057. c7e6oAoC	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1058. c7e6oyAoC	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1059. Cc6oA	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1060. Ipc9oAoB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1061. c2h4cohco	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
1062. c6e5oAoB	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0

1063. c6e5oyAoB	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1064. Ac7oD	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
1065. Ac7oBoD	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1066. chxoAoC	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
1067. chxoAoD	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
1068. BchxoAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1069. DchxoAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1070. Ec5oAoB	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
1071. Fc6e1oCoE	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1072. DchxoqB	G	0	129.14193	300	5000	6	9	3	0	0
1073. chxoqBqjD	G	0	161.14073	300	5000	6	9	5	0	0
1074. chxoAoBojD	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
1075. chxoAoBqD	G	0	144.13336	300	5000	6	8	4	0	0
1076. Fc6oAoDoE	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
1077. Fc6oAoCoD	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
1078. FpchqDqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1079. pche5qD	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1080. pche5ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1081. c9e1qAoF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1082. c9e1ojAoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1083. Dc5oBohE	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1084. c5oBqjDohE	G	0	133.12933	300	5000	5	9	4	0	0
1085. c4oAoC	G	0	86.09462	300	5000	4	6	2	0	0
1086. c4oyAoC	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
1087. c9e1oFqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1088. c9e1oFojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1089. Ipche4e6	G	0	121.21161	300	3000	9	13	0	0	0
1090. Dpche5e7	G	0	121.21161	300	3000	9	13	0	0	0
1091. Ipche5e7	G	0	121.21161	300	3000	9	13	0	0	0
1092. BchxoAoD	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1093. chxe2oAoD	G	0	110.11862	300	5000	6	6	2	0	0
1094. Echxe2oAoD	G	0	109.11065	300	5000	6	5	2	0	0
1095. c6e1oCoyF	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1096. c6e2e5oyAoD	G	0	109.11065	300	5000	6	5	2	0	0
1097. MeBc8e1oIqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1098. MeBc8e1oIojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1099. MeBc6e1oGrF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1100. Fc9e1qEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1101. c9e1e5qH	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1102. c9e1e5ojH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1103. c7e1e6qC	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1104. c7e1e6ojC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1105. Cc7h11-16	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1106. c9e5oAqH	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1107. c9e5oAojH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1108. HpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1109. pche4qB	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1110. pche4ojB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1111. mche1qC	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1112. mche1ojC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1113. MeBc4e1oErD	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1114. ch2ccho	G	0	55.05931	300	5000	3	3	1	0	0
1115. pche5qB	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1116. pche5ojB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1117. Amche3	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1118. Gc7e1e3	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1119. Fc9e1qAqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0

1120. c7e1e6qA	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1121. Bc7e6oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1122. MeEc8e1oIqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1123. MeEc8e1oIojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1124. Bc6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1125. chxe1qC	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
1126. chxe1ojC	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1127. chchhco	G	0	55.05931	300	5000	3	3	1	0	0
1128. c9e5oAqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1129. c9e5oAojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1130. c7e2oAoG	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1131. c7e2oyAoG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1132. c7e2oAoyG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1133. c7e1oAoG	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1134. c7e1oAoyG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1135. Fc6e1oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1136. Dc4e1oA	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
1137. Fc9e1qEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1138. c9e1e6qE	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1139. c9e1e6ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1140. c9e1e5qG	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1141. c9e1e5ojG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1142. c7e2e6oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1143. c7e2e6oyA	G	0	109.15513	300	5000	7	9	1	0	0
1144. c5e2oA	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1145. c5e2oyA	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1146. EtDc7e1qEqHrI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1147. EtDc7e1e8qE	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1148. EtDc7e1e8ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1149. pche3qF	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1150. pche3ojF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1151. MeEc8e5oArI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1152. EtDc7e4oIrA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1153. MeEc7e6e8oA	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
1154. MeEc7e6e8oyA	G	0	123.18307	300	5000	8	11	1	0	0
1155. MeCc6e3oArG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1156. MeCc6e1e7rF	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1157. MeCc5e4e5oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
1158. MeCc5e4e5oyA	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
1159. MeEc8e8oAqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1160. MeEc8e8oAojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1161. Ec6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1162. MeBc6e7oAoF	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1163. MeBc6e7oAoyF	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1164. MeBc6e7oyAoF	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1165. MeBc5e6oArE	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1166. ic3h4hco	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
1167. EtDc7e1oIqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1168. EtDc7e1oIojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1169. MeCc6e5oAoG	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1170. MeCc6e5oyAoG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1171. MeCc6e5oAoyG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1172. MeBc5e4oArF	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1173. Cc6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1174. Dc7oAoC	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1175. c3h7chco	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1176. EtDc7e9oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1177. EtDc7e9oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1178. c9e5oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1179. c9e5oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1180. MeCc6e1oG	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1181. MeCc6e1oyG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1182. c7e3oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1183. chxoAqC	G	0	130.14990	300	5000	6	10	3	0	0
1184. chxoAojC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1185. Fc6oAoC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1186. Fc6oAoE	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1187. AmchqBqD	G	0	161.18521	300	5000	7	13	4	0	0
1188. mche1qD	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1189. mche1ojD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1190. MeEc6e5oArG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1191. MeCc6e7oArF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1192. MeCc4e3oArE	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1193. pche6qD	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1194. pche6ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1195. Ac9e2oF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1196. Ac9e3oF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1197. Ac7e1oD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1198. Dc9e8oA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1199. EtDc7e6oArI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1200. Dc7e6oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1201. Ic9e3oB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1202. Gc7e3oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1203. Gc7e4oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1204. Ec5e4oB	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1205. Dc9e8oB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1206. EtDc7e6oBrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1207. Dc7e6oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1208. MeDc8e7oBrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1209. MeDc8e9oCrH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1210. MeCc6e7oDrA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1211. Bc5e1oC	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1212. c9e6oyA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1213. Hc8h15-3	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1214. Ac9e6oD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1215. Ac7e4oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1216. EtDc7e6oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1217. Dc9e8oC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1218. Dc7e1oE	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1219. eche1oF	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
1220. MeDc8e7oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1221. MeBc8e9oyA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1222. MeCc6e7oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1223. MeBc5e1rF	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
1224. MeDc7e8rA	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1225. mche1oE	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1226. EtDc7e1oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1227. Dc7e1oC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1228. MeEc8e1oyI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1229. c6e1e5oC	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
1230. Ec8h15-1	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1231. EtDc7e1oHrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1232. Fc9e1oE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1233. c7e1e6oC	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1234. Fc9e1oC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1235. MeEc8e1oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1236. EtDc7e1oyI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1237. MeDc7e1rH	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1238. ch2cco	G	0	54.05134	300	5000	3	2	1	0	0
1239. Etall	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
1240. EpchqDqB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1241. mche1qDqF	G	0	160.17724	300	5000	7	12	4	0	0
1242. mche1qDojF	G	0	143.16987	300	5000	7	11	3	0	0
1243. MeEc8e9oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1244. MeEc6e5oAqCrG	G	0	143.16987	300	5000	7	11	3	0	0
1245. Dc4oAqC	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
1246. MeCc6e7oAqErF	G	0	143.16987	300	5000	7	11	3	0	0
1247. MeCc6e5e7oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1248. MeCc6e5e7oyA	G	0	109.15513	300	5000	7	9	1	0	0
1249. MeBc5e1e4rF	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
1250. MeEc8e9oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1251. MeCc6e7oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1252. Ic9e3qFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1253. c9e1e6qD	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1254. c9e1e6ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1255. c6e3oA	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1256. c6e3oyA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1257. BchxqAqC	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
1258. c9e6oAqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1259. c9e6oAojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1260. MeEc8e1oIqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1261. MeEc8e1oIojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1262. pche5qH	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1263. pche5ojH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1264. EtDc7e1oIrC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1265. pche4qH	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1266. pche4ojH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1267. MeEc8e9oArD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1268. c9e6oAqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1269. c9e6oAojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1270. BchxqAqD	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
1271. chxe1qD	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
1272. chxe1ojD	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1273. ac3h4hco1	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
1274. pche6qI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1275. pche6ojI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1276. pche5qI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1277. pche5ojI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1278. Fc9e4oA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1279. c7e4e6oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1280. c7e4e6oyA	G	0	109.15513	300	5000	7	9	1	0	0
1281. AchxqBqD	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
1282. c9e6oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1283. c9e6oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1284. c7e4oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1285. chxe1qjC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1286. Echxe1qC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1287. chxe1qCqjE	G	0	145.14133	300	5000	6	9	4	0	0
1288. chxe1oCqE	G	0	128.13396	300	5000	6	8	3	0	0
1289. chxe1oCojE	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1290. c6e2e5oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
1291. c6e2e5oyA	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
1292. c8h15hco	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
1293. c8h15co	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1294. c9oAoF	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1295. MeEc8oAoI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1296. MeEc8oyAoI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1297. MeEc8oAoyI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1298. EtDc7oAoI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1299. EtDc7oyAoI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1300. EtDc7oAoyI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1301. c9e8oD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
1302. Hc8oD	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1303. MeDc7oHrA	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1304. Ec8oA	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1305. EtCc6oArH	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1306. MeDc7oArH	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1307. c5oAoE	G	0	100.12256	300	5000	5	8	2	0	0
1308. eche1	G	0	110.20758	300	5000	8	14	0	0	0
1309. ech	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
1310. eche1e3	G	0	108.19164	300	5000	8	12	0	0	0
1311. c2h3coc2h4	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1312. AechoE	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1313. AechoB	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1314. eche1oE	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
1315. bmepral	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1316. bme1bu	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
1317. bme2bu	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
1318. bddm2pe	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
1319. dddm1pe	G	0	98.19558	300	3000	7	14	0	0	0
1320. dddm2pe	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
1321. bddmpe2	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
1322. bbdtmpe1	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1323. bddm3pe2	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1324. bddm1pe1	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1325. bmepryl	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1326. bme2b1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
1327. cme2b1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
1328. nec5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
1329. dddmpe2	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
1330. bbdtmpe3	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1331. dddm2pe1	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1332. bddtmpe2	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1333. bddtmpe1	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1334. bddm1pe3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1335. bddm2pe3	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1336. dddm2pe2	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1337. dm2my1pe	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1338. dddm1pe3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1339. bddm2pe1	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1340. dddm1pe2	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1341. oc7h14	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1342. bme2pe4	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
1343. bddm1pe	G	0	98.19558	300	3000	7	14	0	0	0
1344. c4h8o	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1345. c4h7o	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1346. i2c8h16	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
1347. i1c8h16	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0

1348. ic8h15	G	0	111.21555	200	5000	8	15	0	0	0
1349. pc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
1350. hxol1j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1351. hxol2j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1352. hxol3j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1353. hxol4j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1354. hxol5j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1355. hxol6j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1356. hxol2e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1357. hxol3e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1358. hxol4e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1359. hxol5e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1360. hxol4e6j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1361. hxol3e5j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1362. hxol2e4j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1363. hxol5e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1364. hxol4e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1365. hxol3e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1366. hxol2e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1367. c5h9hco-1	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1368. c5h9hco-2	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1369. c5h9hco-3	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1370. c5h9co-1	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1371. c5h9co-2	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1372. c5h9co-3	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1373. Ec5h9-2	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
1374. pe1ol5j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1375. pe1ol4j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1376. pe1ol3j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1377. pe1ol2j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1378. pe1ol1j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1379. pe1ol4e	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1380. pe1jol4e	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1381. pe1ol2e4e	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1382. pe1jol2e4e	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1383. pe1ol3e5j	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1384. b1ol	G	0	74.12710	300	5000	4	10	1	0	0
1385. c4h9o	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1386. b1ol1j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1387. b1ol2j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1388. b1ol3j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1389. b1ol4j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1390. b1*o4ol	G	0	88.11056	300	5000	4	8	2	0	0
1391. b1j*o4ol	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
1392. b1ol2e4j	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1393. b1ol3e	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1394. b1jol3e	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1395. ch2ch2ch2oh	G	0	59.09119	300	5000	3	7	1	0	0
1396. hoc2h4hco	G	0	74.08262	300	5000	3	6	2	0	0
1397. hoc2h4co	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
1398. c2h3ch2oh	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
1399. c2h3choh	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
1400. hoch2hco	G	0	60.05468	300	5000	2	4	2	0	0
1401. hoch2co	G	0	59.04671	300	5000	2	3	2	0	0
1402. c4h5hco	G	0	82.10722	300	5000	5	6	1	0	0
1403. c4h5co	G	0	81.09925	300	5000	5	5	1	0	0
1404. nc3h7o2	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1405. nc3h7o2h	G	0	76.09856	300	5000	3	8	2	0	0
1406. ic3h7o2	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1407. ic3h7o2h	G	0	76.09856	300	5000	3	8	2	0	0
1408. c3h6ooh1-2	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1409. c3h6ooh1-3	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1410. c3h6ooh2-1	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1411. c3h6ooh1-2o2	G	0	107.08939	300	5000	3	7	4	0	0
1412. c3h6ooh1-3o2	G	0	107.08939	300	5000	3	7	4	0	0
1413. c3h6ooh2-1o2	G	0	107.08939	300	5000	3	7	4	0	0
1414. c3ket12	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
1415. c3ket13	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
1416. c3ket21	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
1417. c5h11qjA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1418. c5h11qjB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1419. c5h11qjC	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1420. c5h10rAqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1421. c5h10rBqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1422. c5h10rCqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1423. c5h10rDqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1424. c5h10rEqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1425. c5h10rAqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1426. c5h10rBqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1427. c5h10rCqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1428. c5h10rDqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1429. c5h10rEqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1430. c5h10rAqC	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1431. c5h10rBqC	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1432. c5h10qjAqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1433. c5h10qjBqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1434. c5h10qjCqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1435. c5h10qjDqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1436. c5h10qjEqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1437. c5h10qjAqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1438. c5h10qjBqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1439. c5h10qjCqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1440. c5h10qjDqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1441. c5h10qjEqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1442. c5h10qjAqC	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1443. c5h10qjBqC	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1444. c5h9oAqA	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1445. c5h9oAqB	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1446. c5h9oAqC	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1447. c5h9oAqD	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1448. c5h9oAqE	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1449. c5h9oBqA	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1450. c5h9oBqC	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1451. c5h9oBqD	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1452. c5h9oBqE	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1453. c5h9oCqA	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1454. c5h9oCqB	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1455. c5h10o-AB	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1456. c5h10o-BC	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1457. c5h10o-AC	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1458. c5h10o-BD	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1459. c5h10o-AD	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1460. c5h10o-AE	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1461. nc5h11o2h	G	0	104.15444	300	5000	5	12	2	0	0
1462. nc3h7coch2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1463. nc3h7coch2o2	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
1464. nc3h7coch2o2h	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1465. nc3h7coch2o	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1466. c3h6coch3-1	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1467. c3h6coch3-2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1468. c3h6coch3-3	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1469. c2h5coc2h5	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1470. c2h5coc2h4p	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1471. c2h5coc2h4o2	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
1472. c2h5coc2h4o2h	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1473. c2h5coc2h4o	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1474. c2h5coc2h4s	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1475. pc2h4coc2h3	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1476. sc2h4coc2h3	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1477. divinket	G	0	82.10722	300	5000	5	6	1	0	0
1478. c6h13qjA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1479. c6h13qjB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1480. c6h13qjC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1481. c6h13qA	G	0	118.18238	300	5000	6	14	2	0	0
1482. c6h13qB	G	0	118.18238	300	5000	6	14	2	0	0
1483. c6h13qC	G	0	118.18238	300	5000	6	14	2	0	0
1484. c6h13ojA	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1485. c6h13ojB	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1486. c6h13ojC	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1487. c6h12rBqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1488. c6h12rCqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1489. c6h12rDqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1490. c6h12rEqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1491. c6h12rAqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1492. c6h12rCqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1493. c6h12rDqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1494. c6h12rEqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1495. c6h12rFqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1496. c6h12rAqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1497. c6h12rBqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1498. c6h12rDqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1499. c6h12rEqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1500. c6h12rFqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1501. c6h12qjBqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1502. c6h12qjCqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1503. c6h12qjDqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1504. c6h12qjEqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1505. c6h12qjAqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1506. c6h12qjCqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1507. c6h12qjDqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1508. c6h12qjEqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1509. c6h12qjFqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1510. c6h12qjAqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1511. c6h12qjBqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1512. c6h12qjDqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1513. c6h12qjEqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1514. c6h12qjFqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1515. c6h11oAqB	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1516. c6h11oAqC	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1517. c6h11oAqD	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1518. c6h11oAqE	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1519. c6h11oBqA	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1520. c6h11oBqC	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1521. c6h11oBqD	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1522. c6h11oBqE	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1523. c6h11oBqF	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1524. c6h11oCqA	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1525. c6h11oCqB	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1526. c6h11oCqD	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1527. c6h11oCqE	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1528. c6h11oCqF	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1529. c6h12o-AB	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1530. c6h12o-BC	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1531. c6h12o-CD	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1532. c6h12o-AC	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1533. c6h12o-BD	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1534. c6h12o-AD	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1535. c6h12o-BE	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1536. c6h12o-AE	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1537. hexanone	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1538. c7h15qjA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1539. c7h15qjB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1540. c7h15qjC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1541. c7h15qjD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1542. c7h14rBqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1543. c7h14rCqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1544. c7h14rDqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1545. c7h14rEqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1546. c7h14rAqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1547. c7h14rCqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1548. c7h14rDqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1549. c7h14rEqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1550. c7h14rFqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1551. c7h14rAqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1552. c7h14rBqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1553. c7h14rDqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1554. c7h14rEqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1555. c7h14rFqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1556. c7h14rGqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1557. c7h14rAqD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1558. c7h14rBqD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1559. c7h14rCqD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1560. c7h14qjBqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1561. c7h14qjCqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1562. c7h14qjDqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1563. c7h14qjEqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1564. c7h14qjAqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1565. c7h14qjCqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1566. c7h14qjDqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1567. c7h14qjEqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1568. c7h14qjFqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1569. c7h14qjAqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1570. c7h14qjBqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1571. c7h14qjDqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1572. c7h14qjEqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1573. c7h14qjFqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1574. c7h14qjGqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1575. c7h14qjAqD	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0

1576. c7h14qjBqD	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1577. c7h14qjCqD	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1578. c7h14o-AB	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1579. c7h14o-BC	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1580. c7h14o-CD	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1581. c7h14o-AC	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1582. c7h14o-BD	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1583. c7h14o-CE	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1584. c7h14o-AD	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1585. c7h14o-BE	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1586. c7h14o-AE	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1587. c7h14o-BF	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1588. c7h15qA	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1589. c7h15qB	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1590. c7h15qC	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1591. c7h15qD	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1592. c7h15ojA	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1593. c7h15ojB	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1594. c7h15ojC	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1595. c7h15ojD	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1596. c7h13oAqB	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1597. c7h13oAqC	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1598. c7h13oAqD	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1599. c7h13oAqE	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1600. c7h13oBqA	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1601. c7h13oBqC	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1602. c7h13oBqD	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1603. c7h13oBqE	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1604. c7h13oBqF	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1605. c7h13oCqA	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1606. c7h13oCqB	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1607. c7h13oCqD	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1608. c7h13oCqE	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1609. c7h13oCqF	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1610. c7h13oCqG	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1611. c7h13oDqA	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1612. c7h13oDqB	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1613. c7h13oDqC	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1614. heptanone	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1615. c6h11hco	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1616. c6h11co	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1617. c8h17qjA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1618. c8h17qjB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1619. c8h17qjC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1620. c8h17qjD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1621. c8h16rBqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1622. c8h16rCqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1623. c8h16rDqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1624. c8h16rEqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1625. c8h16rAqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1626. c8h16rCqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1627. c8h16rDqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1628. c8h16rEqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1629. c8h16rFqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1630. c8h16rAqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1631. c8h16rBqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1632. c8h16rDqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1633. c8h16rEqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1634. c8h16rFqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1635. c8h16rGqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1636. c8h16rAqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1637. c8h16rBqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1638. c8h16rCqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1639. c8h16rEqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1640. c8h16rFqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1641. c8h16rGqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1642. c8h16rHqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1643. c8h16qjBqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1644. c8h16qjCqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1645. c8h16qjDqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1646. c8h16qjEqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1647. c8h16qjAqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1648. c8h16qjCqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1649. c8h16qjDqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1650. c8h16qjEqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1651. c8h16qjFqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1652. c8h16qjAqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1653. c8h16qjBqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1654. c8h16qjDqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1655. c8h16qjEqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1656. c8h16qjFqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1657. c8h16qjGqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1658. c8h16qjAqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1659. c8h16qjBqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1660. c8h16qjCqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1661. c8h16qjEqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1662. c8h16qjFqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1663. c8h16qjGqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1664. c8h16qjHqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1665. c8h16o-AB	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1666. c8h16o-BC	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1667. c8h16o-CD	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1668. c8h16o-DE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1669. c8h16o-AC	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1670. c8h16o-BD	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1671. c8h16o-CE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1672. c8h16o-AD	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1673. c8h16o-BE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1674. c8h16o-CF	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1675. c8h16o-AE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1676. c8h16o-BF	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1677. c8h17qA	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1678. c8h17qB	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1679. c8h17qC	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1680. c8h17qD	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1681. c8h17ojA	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1682. c8h17ojB	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1683. c8h17ojC	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1684. c8h17ojD	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1685. c8h15oAqB	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1686. c8h15oAqC	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1687. c8h15oAqD	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1688. c8h15oAqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1689. c8h15oBqA	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1690. c8h15oBqC	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1691. c8h15oBqD	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1692. c8h15oBqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1693. c8h15oBqF	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1694. c8h15oCqA	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1695. c8h15oCqB	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1696. c8h15oCqD	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1697. c8h15oCqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1698. c8h15oCqF	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1699. c8h15oCqG	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1700. c8h15oDqA	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1701. c8h15oDqB	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1702. c8h15oDqC	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1703. c8h15oDqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1704. c8h15oDqF	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1705. c8h15oDqG	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1706. c8h15oDqH	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1707. octanone	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1708. c9h19qjA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1709. c9h19qjB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1710. c9h19qjC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1711. c9h19qjD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1712. c9h19qjE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1713. c9h18rBqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1714. c9h18rCqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1715. c9h18rDqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1716. c9h18rEqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1717. c9h18rAqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1718. c9h18rCqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1719. c9h18rDqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1720. c9h18rEqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1721. c9h18rFqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1722. c9h18rAqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1723. c9h18rBqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1724. c9h18rDqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1725. c9h18rEqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1726. c9h18rFqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1727. c9h18rGqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1728. c9h18rAqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1729. c9h18rBqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1730. c9h18rCqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1731. c9h18rEqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1732. c9h18rFqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1733. c9h18rGqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1734. c9h18rHqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1735. c9h18rAqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1736. c9h18rBqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1737. c9h18rCqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1738. c9h18rDqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1739. c9h18qjBqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1740. c9h18qjCqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1741. c9h18qjDqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1742. c9h18qjEqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1743. c9h18qjAqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1744. c9h18qjCqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1745. c9h18qjDqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1746. c9h18qjEqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1747. c9h18qjFqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1748. c9h18qjAqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1749. c9h18qjBqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1750. c9h18qjDqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1751. c9h18qjEqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1752. c9h18qjFqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1753. c9h18qjGqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1754. c9h18qjAqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1755. c9h18qjBqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1756. c9h18qjCqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1757. c9h18qjEqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1758. c9h18qjFqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1759. c9h18qjGqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1760. c9h18qjHqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1761. c9h18qjAqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1762. c9h18qjBqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1763. c9h18qjCqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1764. c9h18qjDqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1765. c9h17oAqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1766. c9h17oAqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1767. c9h17oAqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1768. c9h17oAqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1769. c9h17oBqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1770. c9h17oBqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1771. c9h17oBqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1772. c9h17oBqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1773. c9h17oBqF	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1774. c9h17oCqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1775. c9h17oCqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1776. c9h17oCqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1777. c9h17oCqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1778. c9h17oCqF	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1779. c9h17oCqG	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1780. c9h17oDqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1781. c9h17oDqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1782. c9h17oDqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1783. c9h17oDqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1784. c9h17oDqF	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1785. c9h17oDqG	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1786. c9h17oDqH	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1787. c9h17oEqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1788. c9h17oEqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1789. c9h17oEqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1790. c9h17oEqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1791. c9h18o-AB	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1792. c9h18o-BC	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1793. c9h18o-CD	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1794. c9h18o-DE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1795. c9h18o-AC	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1796. c9h18o-BD	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1797. c9h18o-CE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1798. c9h18o-DF	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1799. c9h18o-AD	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1800. c9h18o-BE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1801. c9h18o-CF	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1802. c9h18o-AE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1803. c9h18o-BF	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0

1804. c9h18o-CG	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1805. c9h19qA	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
1806. c9h19qB	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
1807. c9h19qC	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
1808. c9h19qD	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
1809. c9h19qE	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
1810. c9h19ojA	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
1811. c9h19ojB	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
1812. c9h19ojC	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
1813. c9h19ojD	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
1814. c9h19ojE	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
1815. nonanone	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1816. c10h21qjA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1817. c10h21qjB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1818. c10h21qjC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1819. c10h21qjD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1820. c10h21qjE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1821. c10h21qA	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
1822. c10h21qB	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
1823. c10h21qC	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
1824. c10h21qD	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
1825. c10h21qE	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
1826. c10h21ojA	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
1827. c10h21ojB	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
1828. c10h21ojC	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
1829. c10h21ojD	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
1830. c10h21ojE	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
1831. c10h20rBqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1832. c10h20rCqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1833. c10h20rDqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1834. c10h20rEqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1835. c10h20rAqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1836. c10h20rCqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1837. c10h20rDqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1838. c10h20rEqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1839. c10h20rFqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1840. c10h20rAqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1841. c10h20rBqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1842. c10h20rDqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1843. c10h20rEqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1844. c10h20rFqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1845. c10h20rGqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1846. c10h20rAqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1847. c10h20rBqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1848. c10h20rCqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1849. c10h20rEqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1850. c10h20rFqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1851. c10h20rGqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1852. c10h20rHqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1853. c10h20rAqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1854. c10h20rBqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1855. c10h20rCqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1856. c10h20rDqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1857. c10h20rFqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1858. c10h20rGqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1859. c10h20rHqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
1860. c10h20rIqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0

1861. c10h20qjBqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1862. c10h20qjCqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1863. c10h20qjDqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1864. c10h20qjEqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1865. c10h20qjAqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1866. c10h20qjCqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1867. c10h20qjDqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1868. c10h20qjEqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1869. c10h20qjFqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1870. c10h20qjAqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1871. c10h20qjBqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1872. c10h20qjDqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1873. c10h20qjEqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1874. c10h20qjFqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1875. c10h20qjGqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1876. c10h20qjAqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1877. c10h20qjBqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1878. c10h20qjCqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1879. c10h20qjEqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1880. c10h20qjFqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1881. c10h20qjGqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1882. c10h20qjHqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1883. c10h20qjAqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1884. c10h20qjBqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1885. c10h20qjCqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1886. c10h20qjDqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1887. c10h20qjFqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1888. c10h20qjGqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1889. c10h20qjHqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1890. c10h20qjIqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
1891. c10h19oAqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1892. c10h19oAqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1893. c10h19oAqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1894. c10h19oAqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1895. c10h19oBqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1896. c10h19oBqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1897. c10h19oBqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1898. c10h19oBqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1899. c10h19oBqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1900. c10h19oCqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1901. c10h19oCqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1902. c10h19oCqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1903. c10h19oCqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1904. c10h19oCqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1905. c10h19oCqG	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1906. c10h19oDqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1907. c10h19oDqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1908. c10h19oDqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1909. c10h19oDqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1910. c10h19oDqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1911. c10h19oDqG	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1912. c10h19oDqH	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1913. c10h19oEqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1914. c10h19oEqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1915. c10h19oEqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1916. c10h19oEqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1917. c10h19oEqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0

1918. c10h19oEqG	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1919. c10h19oEqH	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1920. c10h19oEqI	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
1921. c10h20o-AB	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1922. c10h20o-BC	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1923. c10h20o-CD	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1924. c10h20o-DE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1925. c10h20o-EF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1926. c10h20o-AC	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1927. c10h20o-BD	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1928. c10h20o-CE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1929. c10h20o-DF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1930. c10h20o-AD	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1931. c10h20o-BE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1932. c10h20o-CF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1933. c10h20o-DG	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1934. c10h20o-AE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1935. c10h20o-BF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1936. c10h20o-CG	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1937. Fc10h19oB	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
1938. Gc10h19oC	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
1939. c9h19hco	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
1940. c9h19co	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
1941. choch2ch2cho	G	0	86.09462	300	5000	4	6	2	0	0
1942. choch2ch2co	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
1943. nc4h9coch2	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1944. nc4h9coch2o2	G	0	131.15787	300	5000	6	11	3	0	0
1945. nc5h11coch2	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
1946. nc5h11coch2o2	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
1947. nc6h13coch2	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1948. nc6h13coch2o2	G	0	159.21375	300	5000	8	15	3	0	0
1949. nc6h13coch2o2h	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1950. nc6h13coch2o	G	0	143.21435	300	5000	8	15	2	0	0
1951. nc7h15coch2	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
1952. nc7h15coch2o2	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1953. nc7h15coch2o2h	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1954. nc7h15coch2o	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
1955. nc3h7coc2h4p	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1956. nc3h7coc2h4o2	G	0	131.15787	300	5000	6	11	3	0	0
1957. nc4h9coc2h4p	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
1958. nc4h9coc2h4o2	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
1959. nc5h11coc2h4p	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1960. nc5h11coc2h4o2	G	0	159.21375	300	5000	8	15	3	0	0
1961. nc5h11coc2h4o2h	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1962. nc5h11coc2h4o	G	0	143.21435	300	5000	8	15	2	0	0
1963. nc6h13coc2h4p	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
1964. nc6h13coc2h4o2	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1965. nc6h13coc2h4o2h	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1966. nc6h13coc2h4o	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
1967. nc5h11coc3h6-1	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
1968. nc5h11coc3h6o2-1G	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
1969. npecoc3h6o2h-1	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1970. nc5h11coc3h6o-1	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
1971. nc4h9coc3h6-1	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1972. nc4h9coc3h6o2-1	G	0	159.21375	300	5000	8	15	3	0	0
1973. nc4h9coc3h6o2h-1G	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1974. nc4h9coc3h6o-1	G	0	143.21435	300	5000	8	15	2	0	0

1975. nc3h7coc3h6-1	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
1976. nc3h7coc3h6o2-1	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
1977. c2h5coc3h6-1	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1978. c2h5coc3h6o2-1	G	0	131.15787	300	5000	6	11	3	0	0
1979. ch3coc5h9-1	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1980. ch2coc5h9-1	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1981. ch3coc5h8-13	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1982. ch3coc5h8-15	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1983. c2h5coc5h9-1	G	0	126.20698	300	5000	8	14	1	0	0
1984. sc2h4coc5h9-1	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1985. c2h5coc5h8-13	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1986. c2h5coc5h8-15	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1987. c2h3coc3h7	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1988. c2h3coc3h6-3	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1989. c2h3coc3h6-2	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1990. c2h3coc4h9	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1991. c2h3coc4h8-4	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1992. c2h3coc4h8-3	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1993. c2h3coc5h11	G	0	126.20698	300	5000	8	14	1	0	0
1994. c2h3coc5h10-5	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1995. c2h3coc5h10-4	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1996. c2h3coc6h13	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
1997. c2h3coc6h12-6	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1998. c2h3coc6h12-5	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1999. chxqjA	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
2000. chxqArC	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
2001. chxo-AC	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
2002. chxqAqjC	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
2003. chxqAqCrE	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
2004. c6e5oAqC	G	0	130.14990	300	5000	6	10	3	0	0
2005. c6e5oAojC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
2006. echoA	G	0	126.20698	300	5000	8	14	1	0	0
2007. echA	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
2008. h2cc	G	0	26.03994	200	6000	2	2	0	0	0
2009. hoco	G	0	45.01877	200	6000	1	1	2	0	0
2010. Ceche1	G	0	109.19961	300	5000	8	13	0	0	0
2011. echoyA	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
2012. echoAoD	G	0	140.19044	300	5000	8	12	2	0	0
2013. echoyAoD	G	0	139.18247	300	5000	8	11	2	0	0
2014. Aeche1	G	0	109.19961	300	5000	8	13	0	0	0
2015. eche2oA	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
2016. vinacrol	G	0	82.10722	300	5000	5	6	1	0	0
2017. Mec8oor	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
2018. AechoD	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
2019. c7h15-2a	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2020. c7h15-3f	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2021. c7h15-3z	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2022. c7h15-3a	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2023. c7h15-3b	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2024. c7h15-3c	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2025. c7h15-3d	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2026. c7h15-3e	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2027. c7h14-1-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
2028. c7h14-2-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
2029. c7h14-3-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
2030. c7h14-4-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
2031. c7h14-z-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0

2032. c7h13-1-3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
2033. c7h13-1-2	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
2034. nc4h9coch3	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
2035. c8h17-3z	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2036. c8h17-3a	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2037. c8h17-3b	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2038. c8h17-3c	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2039. c8h17-3d	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2040. c8h17-3g	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2041. c8h17-3f	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2042. c8h17-3e	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2043. c8h15-1-3	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
2044. c8h17o-1-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2045. c8h17o-2-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2046. c8h17o-3-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2047. c8h17o-4-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2048. c8h17o-5-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2049. c8h17o-6-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2050. c8h17o-7-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2051. c8h17o-z-3	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2052. c5h10cho-2	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2053. c8h17oo-1-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2054. c8h17oo-2-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2055. c8h17oo-3-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2056. c8h17oo-4-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2057. c8h17oo-5-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2058. c8h17oo-6-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2059. c8h17oo-7-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2060. c8h17oo-z-3	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2061. c8h17ooh-1-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2062. c8h17ooh-2-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2063. c8h17ooh-3-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2064. c8h17ooh-4-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2065. c8h17ooh-5-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2066. c8h17ooh-6-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2067. c8h17ooh-7-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2068. c8h17ooh-z-3	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2069. c8ooh1-3z	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2070. c8ooh1-3b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2071. c8ooh1-3c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2072. c8ooh1-3d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2073. c8ooh1-3e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2074. c8ooh2-3a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2075. c8ooh2-3c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2076. c8ooh2-3d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2077. c8ooh2-3e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2078. c8ooh2-3f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2079. c8ooh2-3z	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2080. c8ooh3-3a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2081. c8ooh3-3b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2082. c8ooh3-3d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2083. c8ooh3-3e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2084. c8ooh3-3f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2085. c8ooh3-3g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2086. c8ooh3-3z	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2087. c8ooh4-3a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2088. c8ooh4-3b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2089. c8ooh4-3c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2090. c8ooh4-3e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2091. c8ooh4-3f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2092. c8ooh4-3g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2093. c8ooh4-3z	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2094. c8ooh5-3a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2095. c8ooh5-3b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2096. c8ooh5-3c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2097. c8ooh5-3d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2098. c8ooh5-3f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2099. c8ooh5-3g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2100. c8ooh5-3z	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2101. c8ooh6-3b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2102. c8ooh6-3c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2103. c8ooh6-3d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2104. c8ooh6-3e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2105. c8ooh6-3g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2106. c8ooh6-3z	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2107. c8ooh7-3c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2108. c8ooh7-3d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2109. c8ooh7-3e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2110. c8ooh7-3f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2111. c8oohz-3a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2112. c8oohz-3b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2113. c8oohz-3c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2114. c8oohz-3d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2115. c8oohz-3e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2116. c8oohz-3f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2117. c8h16o1-z-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2118. c8h16o1-2-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2119. c8h16o1-3-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2120. c8h16o1-4-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2121. c8h16o1-5-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2122. c8h16o2-3-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2123. c8h16o2-4-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2124. c8h16o2-5-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2125. c8h16o2-6-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2126. c8h16o2-z-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2127. c8h16o3-4-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2128. c8h16o3-5-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2129. c8h16o3-7-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2130. c8h16o3-z-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2131. c8h16o4-5-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2132. c8h16o4-6-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2133. c8h16o4-7-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2134. c8h16o4-z-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2135. c8h16o5-6-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2136. c8h16o5-7-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2137. c8h16o5-z-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2138. c8h16o6-7-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2139. c8h16o6-z-3	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2140. c8ooh1-ooz-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2141. c8ooh1-oo2-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2142. c8ooh1-oo3-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2143. c8ooh1-oo4-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2144. c8ooh1-oo5-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2145. c8ooh2-oo1-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2146. c8ooh2-oo3-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2147. c8ooh2-oo4-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2148. c8ooh2-oo5-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2149. c8ooh2-oo6-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2150. c8ooh2-ooz-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2151. c8ooh3-oo1-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2152. c8ooh3-oo2-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2153. c8ooh3-oo4-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2154. c8ooh3-oo5-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2155. c8ooh3-oo6-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2156. c8ooh3-oo7-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2157. c8ooh3-ooz-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2158. c8ooh4-oo1-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2159. c8ooh4-oo2-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2160. c8ooh4-oo3-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2161. c8ooh4-oo5-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2162. c8ooh4-oo6-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2163. c8ooh4-oo7-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2164. c8ooh4-ooz-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2165. c8ooh5-oo1-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2166. c8ooh5-oo2-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2167. c8ooh5-oo3-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2168. c8ooh5-oo4-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2169. c8ooh5-oo6-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2170. c8ooh5-oo7-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2171. c8ooh5-ooz-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2172. c8ooh6-oo2-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2173. c8ooh6-oo3-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2174. c8ooh6-oo4-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2175. c8ooh6-oo5-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2176. c8ooh6-oo7-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2177. c8ooh6-ooz-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2178. c8ooh7-oo3-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2179. c8ooh7-oo4-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2180. c8ooh7-oo5-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2181. c8ooh7-oo6-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2182. c8oohz-oo1-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2183. c8oohz-oo2-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2184. c8oohz-oo3-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2185. c8oohz-oo4-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2186. c8oohz-oo5-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2187. c8oohz-oo6-3	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2188. c8ket1-z-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2189. c8ket1-2-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2190. c8ket1-3-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2191. c8ket1-4-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2192. c8ket1-5-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2193. c8ket2-1-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2194. c8ket2-3-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2195. c8ket2-4-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2196. c8ket2-5-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2197. c8ket2-6-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2198. c8ket2-z-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2199. c8ket4-1-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2200. c8ket4-2-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2201. c8ket4-3-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2202. c8ket4-5-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2203. c8ket4-6-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2204. c8ket4-7-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2205. c8ket4-z-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2206. c8ket5-1-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2207. c8ket5-2-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2208. c8ket5-3-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2209. c8ket5-4-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2210. c8ket5-6-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2211. c8ket5-7-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2212. c8ket5-z-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2213. c8ket6-2-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2214. c8ket6-3-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2215. c8ket6-4-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2216. c8ket6-5-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2217. c8ket6-7-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2218. c8ket6-z-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2219. c8ket7-3-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2220. c8ket7-4-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2221. c8ket7-5-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2222. c8ket7-6-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2223. c8ketz-1-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2224. c8ketz-2-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2225. c8ketz-3-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2226. c8ketz-4-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2227. c8ketz-5-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2228. c8ketz-6-3	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2229. ac6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
2230. dc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
2231. mc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
2232. nc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
2233. bc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
2234. cc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
2235. ac6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
2236. bc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
2237. cc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
2238. ec6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
2239. lc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
2240. nc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
2241. ic6h11	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
2242. ac5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
2243. cc5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
2244. dc5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
2245. bc5h10	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
2246. cc5h10	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
2247. ic5h9	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
2248. c6h11-3	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
2249. c4h7cho1-4	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
2250. c4h7co1-4	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
2251. c4h6cho1-43	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
2252. c4h8cho4-2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
2253. nc3h7coc2h4s	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2254. ic4h9cho	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
2255. ic4h9co	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
2256. ic5h11cho	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
2257. ic5h11co	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2258. ic6h13cho	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
2259. ic6h13co	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0

2260. nc3h7coc3h6p	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2261. c3h6coc2h5-2	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2262. ic5h11coch2	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2263. c7h132-4	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
2264. c7h13o2-4	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2265. ic4h9coch2	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2266. c4h6cho1-44	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
2267. c8h17-2a	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2268. c8h17-2b	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2269. c8h17-2c	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2270. c8h17-2d	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2271. c8h17-2e	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2272. c8h17-2f	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2273. c8h17-2g	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
2274. c8h15-1-2	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
2275. c8h17o-1-2	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2276. c8h17o-2-2	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2277. c8h17o-3-2	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2278. c8h17o-4-2	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2279. c8h17o-5-2	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2280. c8h17o-6-2	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2281. c8h17o-7-2	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
2282. c8h17oo-1-2	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2283. c8h17oo-2-2	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2284. c8h17oo-3-2	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2285. c8h17oo-4-2	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2286. c8h17oo-5-2	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2287. c8h17oo-6-2	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2288. c8h17oo-7-2	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2289. c8h17ooh-1-2	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2290. c8h17ooh-2-2	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2291. c8h17ooh-3-2	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2292. c8h17ooh-4-2	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2293. c8h17ooh-5-2	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2294. c8h17ooh-6-2	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2295. c8h17ooh-7-2	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
2296. c8ooh1-2a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2297. c8ooh1-2b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2298. c8ooh1-2c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2299. c8ooh1-2d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2300. c8ooh1-2e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2301. c8ooh2-2a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2302. c8ooh2-2c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2303. c8ooh2-2d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2304. c8ooh2-2e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2305. c8ooh2-2f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2306. c8ooh3-2a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2307. c8ooh3-2b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2308. c8ooh3-2d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2309. c8ooh3-2e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2310. c8ooh3-2f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2311. c8ooh3-2g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2312. c8ooh4-2a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2313. c8ooh4-2b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2314. c8ooh4-2c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2315. c8ooh4-2e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2316. c8ooh4-2f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2317. c8ooh4-2g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2318. c8ooh5-2a	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2319. c8ooh5-2b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2320. c8ooh5-2c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2321. c8ooh5-2d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2322. c8ooh5-2f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2323. c8ooh5-2g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2324. c8ooh6-2b	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2325. c8ooh6-2c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2326. c8ooh6-2d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2327. c8ooh6-2e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2328. c8ooh6-2g	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2329. c8ooh7-2c	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2330. c8ooh7-2d	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2331. c8ooh7-2e	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2332. c8ooh7-2f	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
2333. c8ooh1-oo1-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2334. c8ooh1-oo2-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2335. c8ooh1-oo3-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2336. c8ooh1-oo4-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2337. c8ooh1-oo5-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2338. c8ooh2-oo1-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2339. c8ooh2-oo3-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2340. c8ooh2-oo4-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2341. c8ooh2-oo5-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2342. c8ooh2-oo6-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2343. c8ooh3-oo1-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2344. c8ooh3-oo2-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2345. c8ooh3-oo4-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2346. c8ooh3-oo5-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2347. c8ooh3-oo6-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2348. c8ooh3-oo7-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2349. c8ooh4-oo1-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2350. c8ooh4-oo2-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2351. c8ooh4-oo3-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2352. c8ooh4-oo5-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2353. c8ooh4-oo6-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2354. c8ooh4-oo7-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2355. c8ooh5-oo1-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2356. c8ooh5-oo2-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2357. c8ooh5-oo3-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2358. c8ooh5-oo4-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2359. c8ooh5-oo6-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2360. c8ooh5-oo7-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2361. c8ooh6-oo2-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2362. c8ooh6-oo3-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2363. c8ooh6-oo4-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2364. c8ooh6-oo5-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2365. c8ooh6-oo7-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2366. c8ooh7-oo3-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2367. c8ooh7-oo4-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2368. c8ooh7-oo5-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2369. c8ooh7-oo6-2	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
2370. c8h16o1-1-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2371. c8h16o1-2-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2372. c8h16o1-3-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2373. c8h16o1-4-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2374. c8h16o1-5-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2375. c8h16o2-3-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2376. c8h16o2-4-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2377. c8h16o2-5-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2378. c8h16o2-6-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2379. c8h16o3-4-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2380. c8h16o3-5-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2381. c8h16o3-6-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2382. c8h16o3-7-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2383. c8h16o4-5-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2384. c8h16o4-6-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2385. c8h16o4-7-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2386. c8h16o5-6-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2387. c8h16o5-7-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2388. c8h16o6-7-2	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
2389. c8ket1-1-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2390. c8ket1-2-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2391. c8ket1-3-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2392. c8ket1-4-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2393. c8ket1-5-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2394. c8ket3-1-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2395. c8ket3-2-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2396. c8ket3-4-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2397. c8ket3-5-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2398. c8ket3-6-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2399. c8ket3-7-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2400. c8ket4-1-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2401. c8ket4-2-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2402. c8ket4-3-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2403. c8ket4-5-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2404. c8ket4-6-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2405. c8ket4-7-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2406. c8ket5-1-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2407. c8ket5-2-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2408. c8ket5-3-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2409. c8ket5-4-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2410. c8ket5-6-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2411. c8ket5-7-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2412. c8ket6-2-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2413. c8ket6-3-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2414. c8ket6-4-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2415. c8ket6-5-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2416. c8ket6-7-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2417. c8ket7-3-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2418. c8ket7-4-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2419. c8ket7-5-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2420. c8ket7-6-2	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2421. c7h15-2f	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
2422. c7h14-5-2	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
2423. ic3h7coch2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
2424. ic3h7coc2h4p	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2425. ic3h7coc3h6p	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2426. ic4h9coc2h4p	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2427. ic3h7coc2h3	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
2428. ic3h7chco	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
2429. ic3h6coc2h3	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
2430. tc3h6coc2h3	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0

REACTIONS CONSIDERED	(k = A T**b exp(-E/RT)) A	b	E
1. ch3+oh=ch2oh+h	1.99E+19	-1.7	11157.0
2. ch3+oh=ch3o+h	9.95E+14	-0.8	16872.0
3. ch3+oh=sch2+h2o	6.37E+18	-1.7	11141.0
4. ch3+oh=ch2o+h2	7.39E+14	-1.1	14551.0
5. c2h3+o2=ch2hco+o	3.81E+17	-1.4	5580.0
6. c2h3+o2=ch2o+hco	3.71E+25	-4.0	7043.0
7. c2h3+o2=chocho+h	7.78E+20	-2.9	5541.0
8. c2h3+o2=c2h2+ho2	3.25E+19	-2.3	7932.0
9. c2h2+ch3=pc3h4+h	1.10E+12	0.4	16200.0
10. c2h2+ch3=ac3h4+h	5.10E+11	0.3	25000.0
11. c2h2+ch3=tc3h5	9.30E+27	-5.5	22900.0
12. c2h2+ch3=sc3h5	2.40E+38	-8.2	17100.0
13. c2h2+ch3=ac3h5	4.40E+49	-11.4	36700.0
14. pc3h4=ac3h4	1.90E+57	-12.6	93300.0
15. ac3h4+h=sc3h5	2.60E+31	-6.2	18700.0
16. ac3h4+h=tc3h5	1.50E+45	-9.7	15100.0
17. ac3h4+h=ac3h5	2.40E+52	-11.3	25400.0
18. pc3h4+h=ac3h4+h	3.10E+22	-2.2	14800.0
19. pc3h4+h=tc3h5	7.00E+47	-10.4	16600.0
20. pc3h4+h=sc3h5	1.00E+34	-6.9	8900.0
21. pc3h4+h=ac3h5	2.20E+59	-13.6	34900.0
22. ac3h5+o2=c3h5-aoo	2.43E+39	-9.0	8620.0
23. ac3h5+o2=acrol+oh	3.36E+05	1.8	19190.0
24. ac3h5+o2=ac3h4+ho2	2.06E+04	2.2	17590.0
25. ac3h5+o2=ch2hco+ch2o	3.08E+09	0.4	16910.0
26. ac3h5+o2=c2h2+ch2o+oh	9.71E+20	-2.7	24980.0
27. ac3h5=tc3h5	6.40E+51	-12.1	75700.0
28. ac3h5=sc3h5	9.70E+48	-11.7	73700.0
29. tc3h5=sc3h5	5.10E+52	-13.4	57200.0
30. c2h3+c2h2=c4h4+h	4.90E+16	-1.1	11800.0
31. c2h3+c2h2=nc4h5	8.10E+37	-8.1	13400.0
32. c2h3+c2h2=ic4h5	5.10E+53	-12.6	28800.0
33. c2h3+c2h3=ic4h5+h	1.20E+22	-2.4	13654.0
34. c2h3+c2h3=nc4h5+h	2.40E+20	-2.0	15361.0
35. c4h6=ic4h5+h	5.70E+36	-6.3	112353.0
36. c4h6=nc4h5+h	5.30E+44	-8.6	123608.0
37. nc4h5+c2h2=c6h6+h	1.60E+18	-1.9	7400.0
38. c4h4+h=nc4h5	6.20E+45	-10.1	15800.0
39. c4h4+h=ic4h5	1.50E+48	-10.6	18800.0
40. nc4h3+h=c2h2+h2cc	6.30E+25	-3.3	10014.0
41. ic4h3+h=c2h2+h2cc	2.80E+23	-2.5	10780.0
42. ic4h3+h=c4h4	3.40E+43	-9.0	12120.0
43. nc4h3+h=c4h4	2.00E+47	-10.3	13070.0
44. nc4h3=ic4h3	4.10E+43	-9.5	53000.0
45. nc4h3+h=ic4h3+h	2.50E+20	-1.7	10800.0
46. Dc4h7-1=c4h6+h	1.85E+48	-10.5	51770.0
47. h+o2<=>o+oh	1.04E+14	0.0	15286.0
48. o+h2<=>h+oh	5.08E+04	2.7	6292.0
49. oh+h2<=>h+h2o	4.38E+13	0.0	6990.0
50. o+h2o<=>oh+oh	2.97E+06	2.0	13400.0

```
 51. h2+M<=>h+h+M                                4.58E+19   -1.4   104400.0
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      h2o             Enhanced by    1.200E+01
      co              Enhanced by    1.900E+00
      co2             Enhanced by    3.800E+00
 52. o+o+M<=>o2+M                                6.16E+15   -0.5        0.0
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      h2o             Enhanced by    1.200E+01
      ar              Enhanced by    8.300E-01
      co              Enhanced by    1.900E+00
      co2             Enhanced by    3.800E+00
 53. o+h+M<=>oh+M                                4.71E+18   -1.0        0.0
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      h2o             Enhanced by    1.200E+01
      ar              Enhanced by    7.500E-01
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
 54. h+oh+M<=>h2o+M                              3.50E+22   -2.0        0.0
      h2              Enhanced by    7.300E-01
      h2o             Enhanced by    3.650E+00
      ar              Enhanced by    3.800E-01
 55. h+o2(+M)<=>ho2(+M)                          4.65E+12    0.4        0.0
   Low pressure limit:  0.17370E+20 -0.12300E+01  0.00000E+00
   TROE centering:      0.67000E+00  0.10000E-29  0.10000E+31  0.10000E+31
      h2              Enhanced by    1.300E+00
      co              Enhanced by    1.900E+00
      co2             Enhanced by    3.800E+00
      h2o             Enhanced by    1.000E+01
      ar              Enhanced by    0.000E+00
 56. h+o2(+ar)<=>ho2(+ar)                        4.65E+12    0.4        0.0
   Low pressure limit:  0.68100E+19 -0.12000E+01  0.00000E+00
   TROE centering:      0.70000E+00  0.10000E-29  0.10000E+31  0.10000E+31
 57. ho2+h<=>oh+oh                               7.08E+13    0.0      295.0
 58. h2+o2<=>h+ho2                               5.18E+05    2.4    53502.0
 59. ho2+o<=>oh+o2                               3.25E+13    0.0        0.0
 60. ho2+oh<=>h2o+o2                             2.46E+13    0.0     -497.0
 61. ho2+ho2<=>h2o2+o2                           1.30E+11    0.0    -1630.0
   Declared duplicate reaction...
 62. ho2+ho2<=>h2o2+o2                           3.66E+14    0.0    12000.0
   Declared duplicate reaction...
 63. h2o2(+h2o)<=>oh+oh(+h2o)                    2.00E+12    0.9    48749.0
   Low pressure limit:  0.18650E+26 -0.23000E+01  0.48749E+05
   TROE centering:      0.51000E+00  0.10000E-29  0.10000E+31
 64. h2o2(+M)<=>oh+oh(+M)                        2.00E+12    0.9    48749.0
   Low pressure limit:  0.24900E+25 -0.23000E+01  0.48749E+05
   TROE centering:      0.43000E+00  0.10000E-29  0.10000E+31
      h2o             Enhanced by    0.000E+00
      co2             Enhanced by    1.600E+00
      n2              Enhanced by    1.500E+00
      o2              Enhanced by    1.200E+00
      h2o2            Enhanced by    7.700E+00
      h2              Enhanced by    3.700E+00
      co              Enhanced by    2.800E+00
 65. h2o2+h<=>h2o+oh                             2.41E+13    0.0     3970.0
 66. h2o2+h<=>h2+ho2                             2.15E+10    1.0     6000.0
 67. h2o2+o<=>oh+ho2                             9.55E+06    2.0     3970.0
 68. h2o2+oh<=>h2o+ho2                           1.74E+12    0.0      318.0
```

```
   Declared duplicate reaction...
 69. h2o2+oh<=>h2o+ho2                           7.59E+13    0.0     7269.0
   Declared duplicate reaction...
 70. co+ho2=co2+oh                               1.15E+05    2.3    17550.0
 71. co+o+m=co2+m                                2.83E+13    0.0    -4540.0
      h2o             Enhanced by    1.625E+01
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      co              Enhanced by    1.875E+00
      co2             Enhanced by    3.750E+00
      ch4             Enhanced by    1.625E+01
      c2h6            Enhanced by    1.625E+01
 72. co+o2=co2+o                                 2.53E+12    0.0    47700.0
 73. co+oh=co2+h                                 7.05E+04    2.1     -355.7
   Declared duplicate reaction...
 74. co+oh=co2+h                                 5.76E+12   -0.7      331.8
   Declared duplicate reaction...
 75. hco+m=h+co+m                                1.85E+17   -1.0    17090.0
      h2o             Enhanced by    1.625E+01
      h2              Enhanced by    1.900E+00
      co              Enhanced by    1.875E+00
      co2             Enhanced by    3.750E+00
      ch4             Enhanced by    1.625E+01
      c2h6            Enhanced by    1.625E+01
      ar              Enhanced by    1.000E+00
 76. hco+oh=co+h2o                               1.00E+14    0.0        0.0
 77. hco+o=co+oh                                 3.00E+13    0.0        0.0
 78. hco+o=co2+h                                 3.00E+13    0.0        0.0
 79. hco+h=co+h2                                 7.22E+13    0.0        0.0
 80. hco+o2=co+ho2                               7.58E+12    0.0      410.0
 81. hco+ho2=co2+oh+h                            3.00E+13    0.0        0.0
 82. hco+hco=ch2o+co                             1.81E+13    0.0        0.0
 83. hco+hco=h2+co+co                            3.00E+12    0.0        0.0
 84. h+hco(+M)<=>ch2o(+M)                        1.09E+12    0.5     -260.0
   Low pressure limit:  0.24700E+25 -0.25700E+01  0.42500E+03
   TROE centering:      0.78240E+00  0.27100E+03  0.27550E+04  0.65700E+04
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      ar              Enhanced by    7.000E-01
 85. ch2o+oh=hco+h2o                             3.43E+09    1.2     -447.0
 86. ch2o+ho2=hco+h2o2                           1.12E+06    2.0    12000.0
 87. ch2o+o=hco+oh                               1.81E+13    0.0     3088.0
 88. ch2o+h=hco+h2                               1.27E+08    1.6     2170.0
 89. ch2o+o2=hco+ho2                             1.23E+06    3.0    52000.0
 90. ch3oh(+m)=ch2oh+h(+m)                       2.69E+16   -0.1    98940.0
   Low pressure limit:  0.23400E+41 -0.63300E+01  0.10310E+06
   TROE centering:      0.77300E+00  0.69300E+03  0.53330E+04  0.10000E-09
 91. ch3oh(+m)=ch3+oh(+m)                        1.90E+16    0.0    91730.0
   Low pressure limit:  0.29500E+45 -0.73500E+01  0.95760E+05
   TROE centering:      0.41400E+00  0.27900E+03  0.54590E+04  0.10000E-09
 92. ch3oh+o2=ch2oh+ho2                          2.05E+13    0.0    44910.0
 93. ch3oh+o2=ch3o+ho2                           2.50E+12    0.0    55000.0
 94. ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2                        1.13E+13    0.0    19360.0
 95. ch3oh+oh=ch2oh+h2o                          7.10E+06    1.8     -596.0
```

```
 96. ch3oh+oh=ch3o+h2o                           1.00E+06    2.1      496.7
 97. ch3oh+o=ch2oh+oh                            1.63E+13    0.0     5030.0
 98. ch3oh+h=ch2oh+h2                            1.44E+13    0.0     6095.0
 99. ch3oh+h=ch3o+h2                             3.60E+12    0.0     6095.0
100. ch3oh+h=ch3+h2o                             1.70E+13    0.0     5311.0
101. ch3oh+ch2o=ch3o+ch3o                        1.55E+12    0.0    79570.0
102. ch3oh+ch3=ch2oh+ch4                         3.57E+11    0.0     8663.0
103. ch3oh+ch3=ch3o+ch4                          4.68E+05    2.3    12764.0
104. ch2oh+m=ch2o+h+m                            1.00E+14    0.0    25100.0
      h2o             Enhanced by    1.000E+00
      co              Enhanced by    1.875E+00
      co2             Enhanced by    3.750E+00
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      ch4             Enhanced by    1.625E+01
      c2h6            Enhanced by    1.625E+01
      ar              Enhanced by    7.500E-01
105. ch2oh+h=ch2o+h2                             3.00E+13    0.0        0.0
106. ch2oh+o2=ch2o+ho2                           2.41E+14    0.0     5017.0
   Declared duplicate reaction...
107. ch2oh+o2=ch2o+ho2                           1.51E+15   -1.0        0.0
   Declared duplicate reaction...
108. ch2oh+o=ch2o+oh                             4.22E+13    0.0        0.0
109. ch2oh+oh=ch2o+h2o                           2.41E+13    0.0        0.0
110. ch2oh+ho2=ch2o+h2o2                         1.20E+13    0.0        0.0
111. ch2oh+hco=ch3oh+co                          1.50E+13    0.0        0.0
112. ch2oh+ch2o=ch3oh+hco                        1.29E-01    4.6     6596.0
     Reverse Arrhenius coefficients:             9.63E+03    2.9    13110.0
113. ch2oh+ch3o=ch3oh+ch2o                       4.00E+12    0.0        0.0
114. ch2oh+ch2oh=ch2o+ch3oh                      4.00E+12    0.0        0.0
115. ch3o+m=ch2o+h+m                             4.88E+15    0.0    22773.0
      h2o             Enhanced by    1.625E+01
      co              Enhanced by    1.875E+00
      co2             Enhanced by    3.750E+00
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      ch4             Enhanced by    1.625E+01
      c2h6            Enhanced by    1.625E+01
      ar              Enhanced by    7.500E-01
116. ch3o+ho2=ch2o+h2o2                          3.00E+11    0.0        0.0
117. ch3o+oh=ch2o+h2o                            1.00E+13    0.0        0.0
118. ch3o+o=ch2o+oh                              1.30E+13    0.0        0.0
119. ch3o+h=ch2o+h2                              2.00E+13    0.0        0.0
120. ch3o+o2=ch2o+ho2                            2.35E+10    0.0     1788.0
121. ch3o+ch2o=ch3oh+hco                         1.15E+11    0.0     1280.0
122. ch3o+co=ch3+co2                             1.57E+13    0.0    11804.0
123. ch3o+hco=ch3oh+co                           9.00E+13    0.0        0.0
124. ch3o+c2h5=ch2o+c2h6                         2.41E+13    0.0        0.0
125. ch3o+c2h3=ch2o+c2h4                         2.41E+13    0.0        0.0
126. ch3o+c2h4=ch2o+c2h5                         1.20E+11    0.0     7000.0
127. ch3oh+ch3o=ch3oh+ch2oh                      3.01E+11    0.0     4070.0
128. ch3+ho2=ch4+o2                              1.19E+05    2.2    -3022.0
129. ch4(+m)=ch3+h(+m)                           2.40E+16    0.0   104913.0
   Low pressure limit:  0.45000E+18  0.00000E+00  0.90800E+05
   TROE centering:      0.64000E+00  0.10000E-14  0.31950E+04  0.12126E+05
130. ch4+h=ch3+h2                                4.08E+03    3.2     8760.0
131. ch4+o=ch3+oh                                6.92E+08    1.6     8490.0
132. ch4+oh=ch3+h2o                              1.60E+06    2.1     2462.0
133. ch4+ch2=ch3+ch3                             4.30E+12    0.0    10038.0
```

```
134. ch4+sch2=ch3+ch3                            4.00E+12    0.0        0.0
135. ch4+ho2=ch3+h2o2                            9.04E+12    0.0    24640.0
136. h+ch2(+M)<=>ch3(+M)                         6.00E+14    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.10400E+27 -0.27600E+01  0.16000E+04
   TROE centering:      0.56200E+00  0.91000E+02  0.58360E+04  0.85520E+04
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      ar              Enhanced by    7.000E-01
137. ch+h2(+M)<=>ch3(+M)                         1.97E+12    0.4     -370.0
   Low pressure limit:  0.48200E+26 -0.28000E+01  0.59000E+03
   TROE centering:      0.57800E+00  0.12200E+03  0.25350E+04  0.93650E+04
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      ar              Enhanced by    7.000E-01
138. ch3+ho2=ch3o+oh                             1.00E+12    0.3     -687.5
139. ch3+o=ch2o+h                                4.54E+13    0.1     -136.0
140. ch3+o=hco+h2                                1.00E+13    0.1     -136.0
141. ch3+o2=ch2o+oh                              1.85E+12    0.0    20270.0
142. ch3+o2=ch3o+o                               1.32E+14    0.0    31398.0
143. ch3+ch3=c2h5+h                              3.01E+13    0.0    13513.0
144. ch3+ch3(+m)=c2h6(+m)                        3.61E+13    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.12690E+42 -0.70000E+01  0.27620E+04
   TROE centering:      0.62000E+00  0.73000E+02  0.11800E+04  0.10000E+16
145. ch3+ch3o=ch4+ch2o                           2.41E+13    0.0        0.0
146. ch3+ch2oh=ch4+ch2o                          2.41E+12    0.0        0.0
147. ch3+o2(+m)=ch3o2(+m)                        7.83E+08    1.2        0.0
   Low pressure limit:  0.58000E+26 -0.33000E+01  0.00000E+00
   TROE centering:      0.66400E+00  0.10000E+06  0.10000E+02
148. ch3+h=ch2+h2                                6.03E+13    0.0    15100.0
149. ch3+hco=co+ch4                              1.21E+14    0.0        0.0
150. ch3+ch2o=hco+ch4                            7.80E-08    6.1     1970.0
151. ch2+oh=ch+h2o                               1.13E+07    2.0     3000.0
152. ch2+oh=ch2o+h                               2.50E+13    0.0        0.0
153. ch2+o=co+h+h                                5.00E+13    0.0        0.0
154. ch2+o=co+h2                                 6.00E+13    0.0        0.0
155. ch2+h=ch+h2                                 1.00E+18   -1.6        0.0
156. ch2+o2=co2+h2                               3.45E+11    0.0     1000.0
157. ch2+o2=co2+h+h                              1.60E+12    0.0     1000.0
158. ch2+o2=co+h2o                               1.87E+10    0.0    -1000.0
159. ch2+o2=ch2o+o                               5.00E+13    0.0     9000.0
160. ch2+o2=hco+oh                               4.30E+10    0.0     -500.0
161. ch2+o2=co+oh+h                              8.64E+10    0.0     -500.0
162. ch2+co2=ch2o+co                             1.10E+11    0.0     1000.0
163. ch2+ch2=c2h2+h2                             3.20E+13    0.0        0.0
164. ch2+ch2=c2h2+h+h                            4.00E+13    0.0        0.0
165. ch2+ch3=c2h4+h                              4.00E+13    0.0        0.0
166. ch2+ch=c2h2+h                               4.00E+13    0.0        0.0
167. ch2+c2h2=h+c3h3                             1.20E+13    0.0     6620.0
168. ch2+c2h4=c3h6                               4.30E+12    0.0    10038.0
```

```
169. ch2+c2h6=ch3+c2h5                            6.50E+12    0.0     7911.0
170. sch2+m=ch2+m                                 1.00E+13    0.0        0.0
      h               Enhanced by    0.000E+00
      h2o             Enhanced by    0.000E+00
      co              Enhanced by    1.875E+00
      co2             Enhanced by    3.750E+00
      ch4             Enhanced by    1.625E+01
      c2h6            Enhanced by    1.625E+01
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      ar              Enhanced by    7.500E-01
171. sch2+h=ch2+h                                 2.00E+14    0.0        0.0
172. sch2+h2o=ch2+h2o                             3.00E+13    0.0        0.0
173. sch2+o2=co+oh+h                              3.00E+13    0.0        0.0
174. sch2+h2=ch3+h                                7.00E+13    0.0        0.0
175. sch2+h=ch+h2                                 3.00E+13    0.0        0.0
176. sch2+o=co+h+h                                1.50E+13    0.0        0.0
177. sch2+o=co+h2                                 1.50E+13    0.0        0.0
178. sch2+oh=ch2o+h                               3.00E+13    0.0        0.0
179. sch2+ho2=ch2o+oh                             3.00E+13    0.0        0.0
180. sch2+h2o2=ch3o+oh                            3.00E+13    0.0        0.0
181. sch2+h2o(+m)=ch3oh(+m)                       4.82E+17   -1.2     1145.0
   Low pressure limit:  0.18800E+39 -0.63600E+01  0.50400E+04
   TROE centering:      0.60270E+00  0.20800E+03  0.39220E+04  0.10180E+05
      h2o             Enhanced by    1.625E+01
      co              Enhanced by    1.875E+00
      co2             Enhanced by    3.750E+00
      ch4             Enhanced by    1.625E+01
      c2h6            Enhanced by    1.625E+01
      h2              Enhanced by    2.500E+00
      ar              Enhanced by    7.500E-01
182. sch2+ch2o=ch3+hco                            1.20E+12    0.0        0.0
183. sch2+hco=ch3+co                              1.80E+13    0.0        0.0
184. sch2+ch3=c2h4+h                              1.80E+13    0.0        0.0
185. sch2+c2h6=ch3+c2h5                           1.20E+14    0.0        0.0
186. sch2+c2h4=ac3h5+h                            1.30E+14    0.0        0.0
187. sch2+c2h2=c3h3+h                             1.80E+14    0.0        0.0
188. sch2+co2=ch2o+co                             3.00E+12    0.0        0.0
189. sch2+ch2co=c2h4+co                           1.60E+14    0.0        0.0
190. ch+oh=hco+h                                  3.00E+13    0.0        0.0
191. ch+o=co+h                                    5.70E+13    0.0        0.0
192. ch+h=C+h2                                    1.10E+14    0.0        0.0
193. ch+o2=hco+o                                  1.00E+13    0.0        0.0
194. ch+o2=co+oh                                  1.00E+13    0.0        0.0
195. ch+co2=hco+co                                3.40E+12    0.0      690.0
196. ch+h2o=ch2o+h                                1.71E+13    0.0     -755.0
197. ch+ch4=c2h4+h                                6.00E+13    0.0        0.0
198. ch+ch3=c2h3+h                                3.00E+13    0.0        0.0
199. ch+ch2o=ch2co+h                              9.46E+13    0.0     -515.0
200. C+oh=co+h                                    5.00E+13    0.0        0.0
201. C+o2=co+o                                    5.80E+13    0.0      576.0
202. ch3o2+ho2=ch3o2h+o2                          2.90E+11    0.0     1552.0
203. ch3o2+ch2o=hco+ch3o2h                        1.99E+12    0.0    11660.0
204. ch3o2+ch4=ch3+ch3o2h                         1.81E+11    0.0    18480.0
205. ch3o2+ch3oh=ch2oh+ch3o2h                     1.80E+12    0.0    13712.0
206. ch3o2+ho2=ch2o+h2o+o2                        9.64E+08    0.0     3440.0
207. ch3o2+ch3o2=ch2o+ch3oh+o2                    1.05E+09    0.0    -3589.0
208. ch3o2+ch3o2=ch3o+ch3o+o2                     4.46E+11    0.0     1030.0
```

```
209. ch3o2+ch3=ch3o+ch3o                          5.06E+12    0.0    -1411.0
210. ch3o2+oh=ch3oh+o2                            6.03E+13    0.0        0.0
211. ch3o2+h=ch3o+oh                              9.60E+13    0.0        0.0
212. ch3o2+h=ch4+o2                               2.11E+10    1.0    16600.0
213. ch3o2+h2o2=ch3o2h+ho2                        2.41E+12    0.0     9936.0
214. ch3o2+o=ch3o+o2                              3.61E+13    0.0        0.0
215. ch3o2+ch3o=ch3o2h+ch2o                       3.01E+11    0.0        0.0
216. ch3o2+ch2oh=ch2o+ch3o2h                      1.21E+13    0.0        0.0
217. ch3o2+h2=ch3o2h+h                            3.01E+13    0.0    26030.0
218. ch3o2h(+m)=ch3o+oh(+m)                       4.05E+19   -1.2    44250.0
   Low pressure limit:  0.38910E+43 -0.75020E+01  0.46756E+05
   TROE centering:      0.83750E+00  0.36562E+05  0.49880E+03  0.99900E+04
219. ch3o2h+oh=ch3o2+h2o                          1.14E+12    0.0     -380.0
220. ch3o2h+o=oh+ch3o2                            2.00E+13    0.0     4750.0
221. ch3o2h+h=ch3o+h2o                            7.30E+10    0.0     1860.0
222. c2h6+o2=c2h5+ho2                             1.00E+13    0.0    51000.0
223. c2h6+h=c2h5+h2                               5.25E+14    0.0    12800.0
224. c2h6+o=c2h5+oh                               9.99E+08    1.5     5803.0
225. c2h6+oh=c2h5+h2o                             5.11E+06    2.1      854.0
226. c2h6+ch3=c2h5+ch4                            5.50E-01    4.0     8290.0
227. c2h6+ho2=c2h5+h2o2                           2.61E+02    3.4    15900.0
228. c2h6+ch3o2=c2h5+ch3o2h                       1.94E+01    3.6    17100.0
229. c2h6+c2h5o2=c2h5+c2h5o2h                     8.60E+00    3.8    17200.0
230. c2h6+ch3o=c2h5+ch3oh                         3.02E+11    0.0     7000.0
231. c2h6+hco=ch2o+c2h5                           4.70E+04    2.7    18235.0
232. c2h6+ch=c2h5+ch2                             1.10E+14    0.0     -260.0
     Reverse Arrhenius coefficients:              3.83E+10    0.6      440.0
233. c2h5+o2=c2h5o+o                              1.10E+13   -0.2    27937.0
234. c2h5+ho2=c2h5o+oh                            1.90E+12    0.0    -1200.0
235. c2h5+ho2=c2h4+h2o2                           1.79E+12    0.0        0.0
236. c2h5+oh=c2h4+h2o                             2.41E+13    0.0        0.0
237. c2h5+oh=>ch3+ch2o+h                          2.41E+13    0.0        0.0
238. c2h5+o=ch2o+ch3                              4.24E+13    0.0        0.0
239. c2h5+o=ch3hco+h                              5.30E+13    0.0        0.0
240. c2h5+o=c2h4+oh                               3.05E+13    0.0        0.0
241. c2h5+h=c2h4+h2                               1.25E+14    0.0     8000.0
242. c2h5+ch3=c2h4+ch4                            1.14E+12    0.0        0.0
243. c2h5+c2h3=c2h4+c2h4                          6.46E+00    0.0        0.0
244. c2h5+c2h5=c2h4+c2h6                          1.40E+12    0.0        0.0
245. h+c2h5(+m)=c2h6(+m)                          5.21E+17   -1.0     1580.0
   Low pressure limit:  0.19900E+42 -0.70800E+01  0.66850E+04
   TROE centering:      0.84220E+00  0.12500E+03  0.22190E+04  0.68820E+04
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
246. c2h5+hco=c2h6+co                             1.21E+14    0.0        0.0
247. c2h5+o2=c2h5o2                               9.42E+36   -8.0     6098.0
248. c2h5+o2=ch3hco+oh                            1.94E+12   -0.5     7765.0
249. c2h5+o2=c2h4+ho2                             2.43E+17   -1.9     4430.0
   Declared duplicate reaction...
250. c2h5+o2=c2h4o2h                              8.84E+37   -9.3    10159.0
251. c2h5+o2=c2h4+ho2                             1.02E+20   -3.0     8639.0
   Declared duplicate reaction...
252. c2h5+o2=c2h4o+oh                             1.93E+20   -3.1     8636.0
```

```
253. c2h5o2=ch3hco+oh                             2.13E+41   -9.8    45919.0
254. c2h5o2=c2h4+ho2                              6.46E+30   -6.1    35147.0
   Declared duplicate reaction...
255. c2h5o2=c2h4o2h                               4.55E+51  -13.3    44125.0
256. c2h5o2=c2h4+ho2                              4.47E+42  -10.1    44734.0
   Declared duplicate reaction...
257. c2h5o2=c2h4o+oh                              3.01E+42  -10.0    44609.0
258. c2h4o2h=ch3hco+oh                            3.10E+37  -10.1    28588.0
259. c2h4o2h=c2h4+ho2                             5.65E+41  -10.9    26490.0
   Declared duplicate reaction...
260. c2h4o2h=c2h4+ho2                             6.58E+41   -9.7    23023.0
   Declared duplicate reaction...
261. c2h4o2h=c2h4o+oh                             1.49E+41   -9.5    22589.0
262. c2h4+h(+M)=c2h5(+M)                          1.37E+09    1.5     1355.0
   Low pressure limit:  0.20260E+40 -0.66420E+01  0.57690E+04
   TROE centering:     -0.56900E+00  0.29900E+03 -0.91470E+04  0.15240E+03
      h2              Enhanced by    4.000E+00
      h2o             Enhanced by    1.200E+01
      co              Enhanced by    3.500E+00
      co2             Enhanced by    7.000E+00
      o2              Enhanced by    4.000E+00
      c2h2            Enhanced by    5.000E+00
263. c2h4+h2=ch3+ch3                              3.77E+12    0.8    84710.0
     Reverse Arrhenius coefficients:              1.00E+14    0.0    32000.0
264. c2h4+ho2=c2h4o+oh                            2.23E+12    0.0    17190.0
     Reverse Arrhenius coefficients:              3.52E+17   -1.2    39670.0
265. c2h4(+M)<=>h2+c2h2(+M)                       8.00E+12    0.4    86770.0
   Low pressure limit:  0.15800E+52 -0.93000E+01  0.97800E+05
   TROE centering:      0.73450E+00  0.18000E+03  0.10350E+04  0.54170E+04
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      ar              Enhanced by    7.000E-01
266. h+c2h3(+M)<=>c2h4(+M)                        6.08E+12    0.3      280.0
   Low pressure limit:  0.14000E+31 -0.38600E+01  0.33200E+04
   TROE centering:      0.78200E+00  0.20750E+03  0.26630E+04  0.60950E+04
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      ar              Enhanced by    7.000E-01
267. c2h4+oh=c2h3+h2o                             1.30E-01    4.2     -860.0
268. c2h4+o=ch3+hco                               1.20E+08    1.4      530.0
269. c2h4+o=ch2hco+h                              2.00E+08    1.4      530.0
270. c2h4+h=c2h3+h2                               1.00E+14    0.0    15009.0
271. c2h4+o2=c2h3+ho2                             4.00E+13    0.0    61500.0
272. c2h4+ch3=c2h3+ch4                            6.63E+00    3.7     9499.0
273. c2h4+ch3o=c2h3+ch3oh                         1.20E+11    0.0     6750.0
     Reverse Arrhenius coefficients:              1.00E+10    0.0     9000.0
274. c2h4+ho2=c2h3+h2o2                           4.80E+04    2.5    27622.0
275. pc2h4oh=c2h4+oh                              6.19E+11    0.0    23650.0
276. pc2h4oh=ch3hco+h                             1.00E+13    0.0    30000.0
```

```
277. pc2h4oh+o2=ch3hco+ho2                        1.00E+12    0.0     2500.0
278. c2h3+ho2=>ch3+co+oh                          3.00E+13    0.0        0.0
279. c2h3+oh=c2h2+h2o                             3.00E+13    0.0        0.0
280. c2h3+h=c2h2+h2                               3.00E+13    0.0        0.0
281. c2h3+o=ch3+co                                1.50E+13    0.0        0.0
282. c2h3+o=ch2co+h                               1.50E+13    0.0        0.0
283. c2h3+ch=ch2+c2h2                             5.00E+13    0.0        0.0
284. c2h3+ch3=c2h2+ch4                            3.91E+11    0.0        0.0
285. c2h3+c2h6=c2h4+c2h5                          1.50E+13    0.0    10000.0
286. c2h3+c2h=c2h2+c2h2                           9.64E+11    0.0        0.0
287. c2h3+hco=c2h4+co                             9.03E+13    0.0        0.0
288. c2h3+ch2o=c2h4+hco                           5.42E+03    2.8     5862.0
289. c2h3+c2h3=c2h2+c2h4                          1.08E+13    0.0        0.0
290. c2h3+ch2=ac3h4+h                             3.00E+13    0.0        0.0
291. c2h3+c2h3=c4h6                               5.00E+13    0.0        0.0
292. c2h3+c2h4=c4h6+h                             5.00E+11    0.0     7310.0
293. c2h2+oh(+m)=c2h2oh(+m)                       2.29E+13    0.0     1808.0
   Low pressure limit:  0.74400E+27 -0.31000E+01  0.18080E+04
   TROE centering:      0.17000E+00  0.18000E+03  0.50000E+05  0.12772E+05
294. c2h2+o2=hcco+oh                              2.00E+08    1.5    30100.0
295. c2h2+o2=c2h+ho2                              1.21E+13    0.0    74520.0
296. c2h2+ho2=ch2co+oh                            6.09E+09    0.0     7948.0
297. c2h2+oh=c2h+h2o                              3.40E+07    2.0    14000.0
298. c2h2+oh=ch3+co                               4.84E-04    4.0    -2000.0
299. c2h2+oh=ch2co+h                              2.19E-04    4.5    -1000.0
300. c2h2+oh=hccoh+h                              5.06E+05    2.3    13500.0
301. c2h2+o=ch2+co                                1.98E+04    2.6      656.0
302. c2h2+o=hcco+h                                4.62E+04    2.6      656.0
303. c2h2+o=c2h+oh                                4.60E+19   -1.4    28950.0
304. c2h2+ch3=c2h+ch4                             1.80E+11    0.0    17290.0
305. c2h2+h(+m)=c2h3(+m)                          2.34E+15   -0.9     3064.0
   Low pressure limit:  0.22540E+41 -0.72690E+01  0.65770E+04
   TROE centering:      0.50000E+00  0.67500E+03  0.67500E+03
      h2o             Enhanced by    5.000E+00
      co              Enhanced by    2.000E+00
      co2             Enhanced by    3.000E+00
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      ar              Enhanced by    7.500E-01
306. c2h2(+M)=h2cc(+m)                            8.00E+14   -0.5    50750.0
   Low pressure limit:  0.24500E+16 -0.64000E+00  0.49700E+05
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      c2h2            Enhanced by    2.500E+00
      c2h4            Enhanced by    2.500E+00
307. h2cc+h=c2h2+h                                1.00E+14    0.0        0.0
308. h2cc+oh=ch2co+h                              2.00E+13    0.0        0.0
309. h2cc+o2=hco+hco                              1.00E+13    0.0        0.0
310. h2cc+c2h2(+M)=c4h4(+M)                       3.50E+05    2.1    -2400.0
   Low pressure limit:  0.14000E+61 -0.12599E+02  0.74170E+04
   TROE centering:      0.98000E+00  0.56000E+02  0.58000E+03  0.41640E+04
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
```

```
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      c2h2              Enhanced by    3.000E+00
      c2h4              Enhanced by    3.000E+00
311. c2h3+h=h2cc+h                               6.00E+13    0.0        0.0
312. c2h4+sch2=h2cc+ch4                          5.00E+13    0.0        0.0
313. c2h+h2=c2h2+h                               1.51E+13    0.0     3100.0
314. c2h+oh=hcco+h                               2.00E+13    0.0        0.0
315. c2h+o=co+ch                                 1.00E+13    0.0        0.0
316. c2h+o2=co+co+h                              1.80E+13    0.0        0.0
317. h+c2h(+m)=c2h2(+m)                          1.00E+17   -1.0        0.0
   Low pressure limit:  0.37500E+34 -0.48000E+01  0.19000E+04
   TROE centering:      0.64640E+00  0.13200E+03  0.13150E+04  0.55660E+04
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
318. c2h4o=ch4+co                                1.21E+13    0.0    57200.0
319. c2h4o+o2=c2h3o+ho2                          4.00E+13    0.0    61500.0
320. c2h4o+h=c2h3+h2o                            5.00E+09    0.0     5000.0
321. c2h4o+h=c2h4+oh                             9.51E+10    0.0     5000.0
322. c2h4o+o=c2h3o+oh                            1.91E+12    0.0     5250.0
323. c2h4o+ch3=ch4+c2h3o                         1.07E+12    0.0    11830.0
324. c2h4o<=>ch3+hco                             3.63E+13    0.0    57200.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            1.01E+04    1.5    -2750.0
325. c2h4o<=>ch3hco                              7.41E+12    0.0    53800.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            9.01E+10    0.2    80800.0
326. c2h4o+oh<=>c2h3o+h2o                        1.78E+13    0.0     3610.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            1.35E+10    0.7    24740.0
327. c2h4o+h<=>c2h3o+h2                          8.00E+13    0.0     9680.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            5.71E+09    0.8    15920.0
328. c2h4o+ho2<=>c2h3o+h2o2                      1.13E+13    0.0    30430.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            4.67E+11    0.1    20670.0
329. c2h4o+ch3o=c2h3o+ch3oh                      1.20E+11    0.0     6750.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            3.61E+09   -0.9    25480.0
330. c2h4o+ch3o2<=>c2h3o+ch3o2h                  1.13E+13    0.0    30430.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            9.08E+12   -0.3    19070.0
331. c2h4o+c2h5o2<=>c2h3o+c2h5o2h                1.13E+13    0.0    30430.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            9.09E+12   -0.3    19080.0
332. c2h5o2+h2o2=c2h5o2h+ho2                     2.41E+12    0.0     9936.0
333. c2h5o2+ch3=c2h5o+ch3o                       8.17E+12    0.0     -906.0
334. c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2                       1.75E+10    0.0    -3275.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            3.76E+13   -0.8    33820.0
335. c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+hco                     1.99E+12    0.0    11660.0
336. c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h                    2.23E+12    0.0    17190.0
337. ch4+c2h5o2=ch3+c2h5o2h                      1.81E+11    0.0    18480.0
338. ch3oh+c2h5o2=ch2oh+c2h5o2h                  1.81E+12    0.0    13710.0
339. ch3o2+c2h5o2=o2+ch3o+c2h5o                  7.74E+10    0.0      -61.0
340. c2h5o2+c2h5o2=c2h5o+c2h5o+o2                7.74E+10    0.0      -61.0
341. c3h6+c2h5o2=ac3h5+c2h5o2h                   3.24E+11    0.0    14900.0
342. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7                   1.70E+13    0.0    20460.0
343. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7                   2.00E+12    0.0    17000.0
344. c4h8+c2h5o2=Cc4h7-1+c2h5o2h                 1.40E+12    0.0    14900.0
```

```
345. c2h5o2h+o=oh+c2h5o2                         2.00E+13    0.0     4750.0
346. c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o                       2.00E+12    0.0     -370.0
347. c2h5o2h+h=ch3hco+oh+h2                      3.20E+13    0.0     7700.0
348. c2h5o2h+ch3=ch3hco+oh+ch4                   5.70E+11    0.0     8700.0
349. c2h5o2h+c2h5=ch3hco+oh+c2h6                 3.40E+11    0.0    11400.0
350. c2h5o2h+oh=ch3hco+oh+h2o                    5.90E+12    0.0      900.0
351. c2h5o2h+hco=ch3hco+oh+ch2o                  1.80E+12    0.0    16700.0
352. c2h5o2h+ch3o=ch3hco+oh+ch3oh                6.30E+11    0.0     5500.0
353. c2h5o2h+ho2=ch3hco+oh+h2o2                  8.00E+11    0.0    16200.0
354. c2h5o2h=c2h5o+oh                            6.31E+14    0.0    42300.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            5.66E+08    1.0    -1705.0
355. ch2hco+o2=ch2co+ho2                         1.58E+10    0.0        0.0
356. ch2hco+o2=ch2o+co+oh                        2.51E+10    0.0        0.0
357. ch2hco+o2=oh+chocho                         2.51E+11    0.0    14640.0
358. ch2hco+o=ch2o+hco                           2.00E+13    0.0     4000.0
359. ch2hco+oh=ch2co+h2o                         1.00E+13    0.0     2000.0
360. ch2hco+h=ch2co+h2                           2.00E+13    0.0     4000.0
361. ch2hco+h=ch3co+h                            5.00E+12    0.0        0.0
362. ch2hco+h=ch3+hco                            9.00E+13    0.0        0.0
363. ch2hco=ch2co+h                              1.43E+15   -0.1    45610.0
364. ch2hco=ch3+co                               2.93E+12    0.3    40330.0
365. ch2hco=ch3co                                1.00E+13    0.0    47100.0
366. ch2+co(+M)<=>ch2co(+M)                      8.10E+11    0.5     4510.0
   Low pressure limit:  0.26900E+34 -0.51100E+01  0.70950E+04
   TROE centering:      0.59070E+00  0.27500E+03  0.12260E+04  0.51850E+04
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
367. ch2co+o2=ch2o+co2                           2.00E+13    0.0    61500.0
368. ch2co+ho2=>ch2o+co+oh                       6.00E+11    0.0    12738.0
369. ch2co+o=ch2+co2                             1.76E+12    0.0     1349.0
370. ch2co+o=hcco+oh                             1.00E+13    0.0     8000.0
371. ch2co+oh=ch2oh+co                           6.93E+12    0.0        0.0
372. ch2co+oh=hco+ch2o                           2.04E+11    0.0        0.0
373. ch2co+oh=hcco+h2o                           1.02E+11    0.0        0.0
374. ch2co+oh=ch3+co2                            3.10E+12    0.0        0.0
375. ch2co+h=ch3+co                              1.11E+07    2.0     2000.0
376. ch2co+h=hcco+h2                             1.80E+14    0.0     8600.0
377. ch2co+ch3=c2h5+co                           2.00E+11    0.0        0.0
378. ch2co+ch3=hcco+ch4                          7.50E+12    0.0    13000.0
379. ch2co+ch2=c2h4+co                           1.00E+12    0.0        0.0
380. ch2co+ch2=hcco+ch3                          3.60E+13    0.0    11000.0
381. chocho(+m)=ch2o+co(+m)                      4.27E+12    0.0    50600.0
   Low pressure limit:  0.89100E+17  0.00000E+00  0.49200E+05
382. chocho(+m)=co+co+h2(+m)                     1.07E+14    0.0    55100.0
   Low pressure limit:  0.25700E+17  0.00000E+00  0.38400E+05
383. chocho+oh=choco+h2o                         1.00E+13    0.0        0.0
384. chocho+o=choco+oh                           7.24E+12    0.0     1970.0
385. chocho+h=ch2o+hco                           1.00E+12    0.0        0.0
386. chocho+ho2=choco+h2o2                       1.70E+12    0.0    10700.0
387. chocho+ch3=choco+ch4                        1.74E+12    0.0     8440.0
388. chocho+o2=hco+co+ho2                        6.30E+13    0.0    30000.0
389. hco+hco=chocho                              1.00E+13    0.0        0.0
```

```
390. choco=hco+co                                2.00E+07    0.0        0.0
391. choco+o2=co+co+ho2                          3.98E+12    0.0    30000.0
392. c2h3o=ch2co+h                               4.96E+13    0.0    14860.0
393. c2h3o=ch3+co                                7.31E+12    0.0    14280.0
394. c2h3o=ch3co                                 8.51E+14    0.0    14000.0
395. c2h3o=ch2hco                                8.74E+31   -6.9    14990.0
396. c2h2oh=ch2co+h                              5.00E+15    0.0    28000.0
397. c2h2oh+h=ch2co+h2                           2.00E+13    0.0     4000.0
398. c2h2oh+o=ch2co+oh                           2.00E+13    0.0     4000.0
399. c2h2oh+oh=ch2co+h2o                         1.00E+13    0.0     2000.0
400. c2h2oh+o2=hco+co2+h2                        4.00E+12    0.0     -250.0
401. hccoh+h=ch2co+h                             1.00E+13    0.0        0.0
402. ch+co(+M)<=>hcco(+M)                        5.00E+13    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.26900E+29 -0.37400E+01  0.19360E+04
   TROE centering:      0.57570E+00  0.23700E+03  0.16520E+04  0.50690E+04
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
403. hcco+oh=hco+co+h                            1.00E+13    0.0        0.0
404. hcco+o=co+co+h                              1.93E+14    0.0      590.0
405. hcco+h=sch2+co                              1.50E+14    0.0        0.0
406. hcco+o2=co2+co+h                            1.46E+12    0.0     2500.0
407. hcco+ch2=c2h+ch2o                           1.00E+13    0.0     2000.0
408. hcco+ch2=c2h3+co                            3.00E+13    0.0        0.0
409. hcco+ch=c2h2+co                             5.00E+13    0.0        0.0
410. hcco+hcco=c2h2+co+co                        1.00E+13    0.0        0.0
411. hcco+o=ch+co2                               2.95E+13    0.0     1113.0
412. hcco+c2h2=c3h3+co                           1.00E+11    0.0     3000.0
413. hcco+ch3=c2h4+co                            2.00E+12    0.0        0.0
414. ch3hco=ch3+hco                              2.45E+16    0.0    84128.0
415. ch2hco+h=ch3hco                             2.00E+14    0.0        0.0
416. ch3hco+ho2=ch3co+h2o2                       3.10E+12    0.0    11920.0
417. ch3hco+oh=ch3co+h2o                         2.65E+12    0.0     -730.0
418. ch3hco+o=ch3co+oh                           5.85E+12    0.0     1808.0
419. ch3hco+h=ch3co+h2                           1.20E+14    0.0     7000.0
420. ch3hco+o2=ch3co+ho2                         3.00E+13    0.0    39150.0
421. ch3hco+ch3=ch3co+ch4                        1.70E+12    0.0     8440.0
422. ch3hco+c2h5=ch3co+c2h6                      1.70E+12    0.0     8440.0
423. ch3hco+hco=ch3co+ch2o                       7.80E+13    0.0     8440.0
424. ch3co+m=ch3+co+m                            8.64E+15    0.0    14400.0
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
      h2                Enhanced by    2.500E+00
      ar                Enhanced by    7.500E-01
425. ch3co+o2=ch3co3                             2.84E+07    2.4      380.0
426. ch3co3+ho2=ch3co3h+o2                       1.75E+10    0.0    -3275.0
427. ch3co3h=ch3co2+oh                           5.01E+14    0.0    40150.0
428. ch3co2+m=ch3+co2+m                          4.40E+15    0.0    10500.0
429. ch3co3=>ch2co+ho2                           3.34E+09    1.0    32500.0
430. ch3co+h=ch2co+h2                            2.00E+13    0.0        0.0
```

```
      Reverse Arrhenius coefficients:            7.27E+09    0.0    83040.0
431. ch3co+o=ch2co+oh                            2.00E+13    0.0        0.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            7.27E+09    0.0    83040.0
432. ch3co+ch3=ch2co+ch4                         5.00E+13    0.0        0.0
      Reverse Arrhenius coefficients:            7.27E+09    0.0    83040.0
433. c2o+o2=co+co+o                              2.00E+13    0.0        0.0
434. c2o+oh=co+co+h                              2.00E+13    0.0        0.0
435. c2o+o=co+co                                 5.00E+13    0.0        0.0
436. c2o+h=ch+co                                 5.00E+13    0.0        0.0
437. c2+o2=co+co                                 5.00E+13    0.0        0.0
438. c2+oh=c2o+h                                 5.00E+13    0.0        0.0
439. c2+h2=c2h+h                                 4.00E+05    2.4     1000.0
440. c2h5oh(+M)=ch3+ch2oh(+M)                    5.94E+23   -1.7    91163.0
   Low pressure limit:  0.28800E+86 -0.18900E+02  0.10991E+06
   TROE centering:      0.50000E+00  0.20000E+03  0.89000E+03  0.46000E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      co2               Enhanced by    3.000E+00
      co                Enhanced by    2.000E+00
441. c2h5oh(+M)=c2h5+oh(+M)                      1.25E+23   -1.5    96005.0
   Low pressure limit:  0.32520E+86 -0.18810E+02  0.11493E+06
   TROE centering:      0.50000E+00  0.30000E+03  0.90000E+03  0.50000E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      co2               Enhanced by    3.000E+00
      co                Enhanced by    2.000E+00
442. c2h5oh(+M)=c2h4+h2o(+M)                     2.79E+13    0.1    66136.0
   Low pressure limit:  0.25700E+84 -0.18850E+02  0.86452E+05
   TROE centering:      0.70000E+00  0.35000E+03  0.80000E+03  0.38000E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
443. c2h5oh(+M)=ch3hco+h2(+M)                    7.24E+11    0.1    91007.0
   Low pressure limit:  0.44600E+88 -0.19420E+02  0.11559E+06
   TROE centering:      0.90000E+00  0.90000E+03  0.11000E+04  0.35000E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
444. c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2                       2.00E+13    0.0    52800.0
445. c2h5oh+o2=ch3choh+ho2                       1.50E+13    0.0    50150.0
446. c2h5oh+c2h5=pc2h4oh+c2h6                    5.00E+10    0.0    13400.0
447. c2h5oh+c2h5=ch3choh+c2h6                    5.00E+10    0.0    10400.0
448. c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o                       6.20E+03    2.7     -576.0
449. c2h5oh+oh=ch3choh+h2o                       1.31E+05    2.4    -1457.0
450. c2h5oh+oh=c2h5o+h2o                         2.81E+02    3.0     -580.0
451. c2h5oh+h=pc2h4oh+h2                         1.88E+03    3.2     7150.0
452. c2h5oh+h=ch3choh+h2                         1.79E+05    2.5     3420.0
453. c2h5oh+h=c2h5o+h2                           5.55E-23   10.6    -4459.0
454. c2h5oh+o=pc2h4oh+oh                         9.69E+02    3.2     4658.0
455. c2h5oh+o=ch3choh+oh                         1.45E+05    2.4      876.0
456. c2h5oh+o=c2h5o+oh                           1.46E-03    4.7     1727.0
457. c2h5oh+ch3=pc2h4oh+ch4                      3.30E+02    3.3    12291.0
458. c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4                      1.99E+01    3.4     7635.0
459. c2h5oh+ch3=c2h5o+ch4                        2.04E+00    3.6     7722.0
460. c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2                     8.20E+03    2.5    10750.0
461. c2h5oh+ho2=pc2h4oh+h2o2                     1.23E+04    2.5    15750.0
462. c2h5oh+ho2=c2h5o+h2o2                       2.50E+12    0.0    24000.0
463. c2h5o=ch3hco+h                              5.43E+15   -0.7    22230.0
464. c2h5o=ch3+ch2o                              1.32E+20   -2.0    20750.0
465. c2h5o+o2=ch3hco+ho2                         4.00E+10    0.0     1100.0
466. c2h5o+h=ch3hco+h2                           1.00E+13    0.0        0.0
```

```
467. c2h5o+oh=ch3hco+h2o                          1.00E+13    0.0        0.0
468. c2h5o+ho2=ch3hco+h2o2                       3.00E+11    0.0        0.0
469. c2h5o+co=c2h5+co2                           4.68E+02    3.2     5380.0
470. ch3choh+o2=ch3hco+ho2                       1.00E+13    0.0     5564.0
471. ch3choh+ch3=c3h6+h2o                        1.00E+13    0.0        0.0
472. ch3choh+o=ch3hco+oh                         1.00E+14    0.0        0.0
473. ch3choh+h=c2h4+h2o                          3.00E+13    0.0        0.0
474. ch3choh+h=ch3+ch2oh                         3.00E+13    0.0        0.0
475. ch3choh+ho2=ch3hco+oh+oh                    4.00E+13    0.0        0.0
476. ch3choh+oh=ch3hco+h2o                       5.00E+12    0.0        0.0
477. ch3choh+M=ch3hco+h+M                        1.00E+14    0.0    25000.0
478. ch2+c3h8=ch3+ic3h7                          2.19E+12    0.0     6405.0
479. ch2+c3h8=ch3+nc3h7                          1.79E+12    0.0     6405.0
480. ch3+c2h5(+m)=c3h8(+m)                       4.90E+14   -0.5        0.0
   Low pressure limit:  0.68000E+62 -0.13420E+02  0.60000E+04
   TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+04  0.14340E+04  0.53290E+04
481. c3h8+o2=nc3h7+ho2                           4.00E+13    0.0    50872.0
482. c3h8+o2=ic3h7+ho2                           4.00E+13    0.0    47500.0
483. c3h8+ho2=nc3h7+h2o2                         4.76E+04    2.5    16494.0
484. c3h8+ho2=ic3h7+h2o2                         9.64E+03    2.6    13910.0
485. c3h8+oh=nc3h7+h2o                           3.16E+07    1.8      934.0
486. c3h8+oh=ic3h7+h2o                           7.08E+06    1.9     -159.0
487. c3h8+o=nc3h7+oh                             3.72E+06    2.4     5505.0
488. c3h8+o=ic3h7+oh                             5.50E+05    2.5     3140.0
489. c3h8+h=nc3h7+h2                             1.34E+06    2.5     6756.0
490. c3h8+h=ic3h7+h2                             1.01E+04    2.9     2931.0
491. c3h8+ch3=nc3h7+ch4                          3.00E+12    0.0    11710.0
492. c3h8+ch3=ic3h7+ch4                          8.07E+11    0.0    10110.0
493. c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6                        3.16E+11    0.0    12300.0
494. c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6                        5.01E+10    0.0    10400.0
495. c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4                        6.00E+02    3.3    10502.0
496. c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4                        1.00E+03    3.1     8829.0
497. c3h8+ic3h7=nc3h7+c3h8                       1.00E+11    0.0    12900.0
498. c3h8+ac3h5=nc3h7+c3h6                       7.94E+11    0.0    20500.0
499. c3h8+ac3h5=ic3h7+c3h6                       7.94E+11    0.0    16200.0
500. c3h8+ch3o=nc3h7+ch3oh                       3.18E+11    0.0     7050.0
501. c3h8+ch3o=ic3h7+ch3oh                       7.20E+10    0.0     4470.0
502. nc3h7(+M)=c2h4+ch3(+M)                      1.23E+13   -0.1    30202.0
   Low pressure limit:  0.55450E+50 -0.10000E+02  0.35766E+05
   TROE centering:      0.21700E+01  0.10000E-14  0.25100E+03  0.11850E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      co2               Enhanced by    3.000E+00
      co                Enhanced by    2.000E+00
503. c3h6+h(+m)=nc3h7(+m)                        1.33E+13    0.0     3260.7
   Low pressure limit:  0.62600E+39 -0.66600E+01  0.70000E+04
   TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+04  0.13100E+04  0.48097E+05
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
504. c3h6+h(+m)=ic3h7(+m)                        5.70E+09    1.2      874.0
   Low pressure limit:  0.16400E+55 -0.11100E+02  0.93640E+04
   TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E-14  0.26000E+03  0.30000E+04
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
```

```
      co2               Enhanced by    3.850E+00
505. nc3h7+o2=c3h6+ho2                           3.70E+16   -1.6     3420.0
506. ic3h7+o2=c3h6+ho2                           6.70E+20   -3.0     2500.0
507. ho2+ic3h7=ic3h7o2h                          4.80E+12    0.0        0.0
508. ho2+nc3h7=nc3h7o2h                          4.80E+12    0.0        0.0
509. nc3h7+o2=nc3h7o2                            4.82E+36   -8.2     5167.0
510. ic3h7+o2=ic3h7o2                            1.84E+45  -11.1     6538.0
511. nc3h7+h=c2h5+ch3                            1.00E+14    0.0        0.0
512. ic3h7+h=c2h5+ch3                            5.00E+13    0.0        0.0
513. ic3h7+h=c3h6+h2                             3.61E+12    0.0        0.0
514. ic3h7+o=aceton+h                            4.82E+13    0.0        0.0
515. ic3h7+o=ch3hco+ch3                          4.82E+13    0.0        0.0
516. nc3h7+o=ch2o+c2h5                           4.82E+13    0.0        0.0
517. nc3h7+o=ethco+h                             4.82E+13    0.0        0.0
518. ch3o2+nc3h7=ch3o+nc3h7o                     1.90E+12    0.0    -1200.0
519. ic3h7o2+nc3h7=ic3h7o+nc3h7o                 1.90E+12    0.0    -1200.0
520. nc3h7o2+nc3h7=nc3h7o+nc3h7o                 1.90E+12    0.0    -1200.0
521. nc3h7+ho2=nc3h7o+oh                         1.90E+12    0.0    -1200.0
522. ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o                     1.90E+12    0.0    -1200.0
523. ic3h7o2+ic3h7=ic3h7o+ic3h7o                 1.90E+12    0.0    -1200.0
524. nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o                 1.90E+12    0.0    -1200.0
525. ic3h7+ho2=ic3h7o+oh                         1.90E+12    0.0    -1200.0
526. nc3h7o=ethco+h                              1.70E+13    0.0    20510.0
527. nc3h7o=c2h5+ch2o                            5.89E+13    0.0    13890.0
528. nc3h7o+o2=ethco+ho2                         8.43E+09    0.0      220.0
529. ic3h7o=aceton+h                             1.58E+13    0.0    18310.0
530. ic3h7o=ch3+ch3hco                           9.12E+13    0.0    14360.0
531. ic3h7o+o2=aceton+ho2                        8.43E+09    0.0      420.0
532. ic3h7o2+acrol=c2h3co+ic3h7o2h               2.80E+12    0.0    13600.0
533. ic3h7o2+c2h4=c2h3+ic3h7o2h                  1.13E+13    0.0    30430.0
534. ic3h7o2+ethco=ic3h7o2h+c2h5co               2.00E+11    0.0     9500.0
535. ic3h7o2+c2h6=ic3h7o2h+c2h5                  1.70E+13    0.0    20460.0
536. ic3h7o2+ch2o=ic3h7o2h+hco                   5.60E+12    0.0    13600.0
537. ic3h7o2+ch3hco=ic3h7o2h+ch3co               2.80E+12    0.0    13600.0
538. ic3h7o2+ch4=ch3+ic3h7o2h                    1.12E+13    0.0    24640.0
539. ic3h7o2+h2=h+ic3h7o2h                       3.01E+13    0.0    26030.0
540. ic3h7o2+ch3oh=ch2oh+ic3h7o2h                6.30E+12    0.0    19360.0
541. ic3h7o2+ho2=ic3h7o2h+o2                     2.90E+11    0.0     1550.0
542. ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+c2h5o+o2              5.00E+10    0.0        0.0
543. ic3h7o2+ic3h7o2=o2+ic3h7o+ic3h7o            5.00E+10    0.0        0.0
544. ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2            5.00E+10    0.0        0.0
545. ic3h7o2+ch3co3=ic3h7o+ch3co2+o2             5.00E+10    0.0        0.0
546. ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2                1.00E+11    0.0        0.0
547. ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2                    1.00E+11    0.0        0.0
548. ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+c2h5o                   1.90E+12    0.0    -1200.0
549. ic3h7o2+ac3h5=ic3h7o+c3h5o                  1.90E+12    0.0    -1200.0
550. ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o                     1.90E+12    0.0    -1200.0
551. ic3h7o2+h2o2=ic3h7o2h+ho2                   2.41E+12    0.0     9936.0
552. nc3h7o2+h2o2=nc3h7o2h+ho2                   2.41E+12    0.0     9936.0
553. nc3h7o2+acrol=c2h3co+nc3h7o2h               2.80E+12    0.0    13600.0
554. nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h                  1.13E+13    0.0    30430.0
555. nc3h7o2+ethco=nc3h7o2h+c2h5co               2.00E+11    0.0     9500.0
556. nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5                  1.70E+13    0.0    20460.0
557. nc3h7o2+ch3hco=nc3h7o2h+ch3co               2.80E+12    0.0    13600.0
558. nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h                    1.12E+13    0.0    24640.0
559. nc3h7o2+h2=h+nc3h7o2h                       3.01E+13    0.0    26030.0
560. nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h                6.30E+12    0.0    19360.0
```

```
561. nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2                     2.90E+11    0.0     1550.0
562. nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+c2h5o+o2              5.00E+10    0.0        0.0
563. nc3h7o2+nc3h7o2=o2+nc3h7o+nc3h7o            5.00E+10    0.0        0.0
564. nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2                1.00E+11    0.0        0.0
565. nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2                    1.00E+11    0.0        0.0
566. nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+c2h5o                   1.90E+12    0.0    -1200.0
567. nc3h7o2+ac3h5=nc3h7o+c3h5o                  1.90E+12    0.0    -1200.0
568. nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o                     1.90E+12    0.0    -1200.0
569. nc3h7o2=c3h6+ho2                            4.16E+08    1.2    29600.0
570. ic3h7o2=c3h6+ho2                            8.16E+08    1.3    30000.0
571. nc3h7o2=ethco+oh                            3.36E+05    2.3    36900.0
572. nc3h7o2=c3h6ooh1-2                          2.86E+07    1.5    29100.0
573. nc3h7o2=c3h6ooh1-3                          2.05E+07    1.3    21700.0
574. ic3h7o2=c3h6ooh2-1                          1.10E+07    1.8    32300.0
575. ic3h7o2=aceton+oh                           5.22E+04    2.5    35700.0
576. nc3h7o2h=nc3h7o+oh                          6.00E+14    0.0    42330.0
577. ic3h7o2h=ic3h7o+oh                          6.00E+14    0.0    42330.0
578. c3h6ooh1-2=c3h6o+oh                         1.21E+09    1.1    11300.0
579. c3h6ooh2-1=c3h6o+oh                         4.45E+09    0.9    10800.0
580. c3h6ooh1-3=c3h6o1-3+oh                      2.64E+09    0.7    18500.0
581. c3h6+ho2=c3h6ooh1-2                         2.47E+04    2.1    12160.0
582. c3h6+ho2=c3h6ooh2-1                         7.74E+03    2.3    11080.0
583. c3h6ooh1-3=>oh+ch2o+c2h4                    2.89E+09    1.3    26700.0
584. c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2                  1.84E+45  -11.1     6538.0
585. c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2                  4.82E+36   -8.2     5167.0
586. c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2                  4.82E+36   -8.2     5167.0
587. c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh                     9.56E+07    1.4    26600.0
588. c3h6ooh1-2o2=c3ket21+oh                     4.87E+05    2.2    35100.0
589. c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh                     9.30E+07    1.1    16200.0
   Declared duplicate reaction...
590. c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh                     6.50E+04    2.5    36500.0
   Declared duplicate reaction...
591. c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh                     2.52E+07    1.4    23300.0
592. c3h6ooh2-1o2=c3ket12+oh                     6.50E+04    2.5    36500.0
593. c3ket12=ch3hco+hco+oh                       6.00E+14    0.0    42330.0
594. c3ket13=ch2o+ch2hco+oh                      6.00E+14    0.0    42330.0
595. c3ket21=ch2o+ch3co+oh                       6.00E+14    0.0    42330.0
596. c3h6o+h=>h2+ch2co+ch3                       2.70E+07    2.0     5000.0
597. c3h6o+oh=>h2o+ch2co+ch3                     7.80E+06    2.0     -765.0
598. c3h6o+ho2=>h2o2+ch2co+ch3                   1.20E+12    0.0    15500.0
599. c3h6o+ch3=>ch4+ch2co+ch3                    6.00E+11    0.0     9600.0
600. c3h6o+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3               6.00E+11    0.0     9600.0
601. c3h6o+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3                  6.00E+11    0.0    11000.0
602. c3h6o+o=>oh+hco+c2h4                        7.80E+13    0.0     5200.0
603. c3h6o1-3+h=>h2+hco+c2h4                     2.70E+07    2.0     5000.0
604. c3h6o1-3+oh=>h2o+hco+c2h4                   7.80E+06    2.0     -765.0
605. c3h6o1-3+ho2=>h2o2+hco+c2h4                 1.20E+12    0.0    15500.0
606. c3h6o1-3+ch3=>ch4+hco+c2h4                  6.00E+11    0.0     9600.0
607. c3h6o1-3+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2h4             4.50E+12    0.0    17500.0
608. c3h6o1-3+c2h5=>c2h6+hco+c2h4                6.00E+11    0.0    11000.0
609. c3h6o1-3+o=>oh+hco+c2h4                     7.80E+13    0.0     5200.0
610. c3h6o=c2h5+hco                              2.45E+13    0.0    58500.0
611. c3h6o=ethco                                 1.82E+14    0.0    58500.0
612. c3h6o=ch3+ch3co                             4.54E+13    0.0    59900.0
613. c3h6o=ch3+ch2hco                            2.45E+13    0.0    58820.0
614. c3h6o=ch3+c2h3o                             8.00E+15    0.0    92010.0
615. c3h6o1-3+h=ch2ch2hco+h2                     2.70E+07    2.0     5000.0
```

```
616. c3h6o1-3+oh=ch2ch2hco+h2o                   7.80E+06    2.0     -765.0
617. c3h6o1-3+ho2=ch2ch2hco+h2o2                 1.20E+12    0.0    15500.0
618. c3h6o1-3+ch3=ch2ch2hco+ch4                  6.00E+11    0.0     9600.0
619. c3h6o1-3=ethco                              1.82E+14    0.0    58500.0
620. ac3h5+h(+m)=c3h6(+m)                        2.00E+14    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.13300E+61 -0.12000E+02  0.59678E+04
   TROE centering:      0.20000E-01  0.10966E+04  0.10966E+04  0.68595E+04
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
621. c2h3+ch3(+m)=c3h6(+m)                       2.50E+13    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.42700E+59 -0.11940E+02  0.97698E+04
   TROE centering:      0.17500E+00  0.13406E+04  0.60000E+05  0.10140E+05
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      c2h2              Enhanced by    3.000E+00
      c2h4              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
622. c3h6=ch4+c2h2                               1.00E+12    0.0    69950.0
623. c3h6=ac3h4+h2                               1.00E+14    0.0    80000.0
624. c3h6+o2=ac3h5+ho2                           1.95E+12    0.0    39000.0
625. c3h6+o2=sc3h5+ho2                           1.40E+13    0.0    60200.0
626. c3h6+o2=tc3h5+ho2                           7.00E+12    0.0    60200.0
627. c3h6+ho2=c3h6o+oh                           1.02E+12    0.0    14964.0
628. c3h6+ho2=ac3h5+h2o2                         1.50E+11    0.0    14190.0
629. c3h6+ho2=sc3h5+h2o2                         7.50E+09    0.0    12570.0
630. c3h6+ho2=tc3h5+h2o2                         3.00E+09    0.0     9930.0
631. c3h6+oh=ac3h5+h2o                           7.70E+05    2.2      622.0
632. c3h6+oh=sc3h5+h2o                           4.52E+00    3.6     -370.0
633. c3h6+oh=tc3h5+h2o                           6.02E+01    3.2    -1520.0
634. c3h6+o=c2h5+hco                             4.69E+07    1.6     -628.0
635. c3h6+o=ch3+ch2hco                           3.90E+07    1.6     -628.0
636. c3h6+o=c2h4+ch2o                            7.02E+07    1.6     -628.0
637. c3h6+o=ac3h5+oh                             1.75E+11    0.7     5884.0
638. c3h6+o=sc3h5+oh                             1.20E+11    0.7     8960.0
639. c3h6+o=tc3h5+oh                             6.02E+10    0.7     7633.0
640. c3h6+h=c2h4+ch3                             3.40E+13    0.0     3500.0
641. c3h6+h=ac3h5+h2                             1.70E+05    2.5     2480.0
642. c3h6+h=sc3h5+h2                             7.83E+05    2.5    12280.0
643. c3h6+h=tc3h5+h2                             3.90E+05    2.5     5820.0
644. c3h6+ch3=ac3h5+ch4                          1.60E+11    0.0     8800.0
645. c3h6+ch3=sc3h5+ch4                          3.30E+11    0.0    10110.0
646. c3h6+ch3=tc3h5+ch4                          5.00E+10    0.0     8030.0
647. c3h6+c2h5=ac3h5+c2h6                        1.00E+11    0.0     9800.0
648. c3h6+c2h3=c4h6+ch3                          7.20E+11    0.0     5008.0
649. sc3h5+ch2o=c3h6+hco                         5.42E+03    2.8     5862.0
650. c3h6+c2h3=ac3h5+c2h4                        2.21E+00    3.5     4682.0
651. c3h6+c2h3=tc3h5+c2h4                        2.21E+00    3.5     4682.0
652. c3h6+c2h3=sc3h5+c2h4                        2.21E+00    3.5     4682.0
653. c3h6+oh=c3h61oh                             1.81E+13    0.0        0.0
654. c3h6+oh=c3h62oh                             1.81E+13    0.0        0.0
```

655. c3h61oh+o2=c3h61oh2oo 1.70E+19 -2.5 0.0
656. c3h62oh+o2=c3h62oh1oo 1.50E+18 -2.5 0.0
657. c3h61oh2oo=ch3hco+ch2o+oh 1.00E+09 0.0 30.0
658. c3h62oh1oo=ch3hco+ch2o+oh 1.00E+09 0.0 30.0
659. ac3h5+ho2=c3h5o+oh 4.50E+12 0.0 0.0
660. ac3h5+h=ac3h4+h2 1.00E+13 0.0 0.0
661. ac3h5+oh=ac3h4+h2o 6.00E+12 0.0 0.0
662. c2h3+ch3=ac3h5+h 1.50E+24 -2.8 18618.0
663. ac3h5+ch3=ac3h4+ch4 1.00E+11 0.0 0.0
664. ac3h5+ch2=c4h6+h 3.00E+13 0.0 0.0
665. ac3h5+c2h5=ac3h4+c2h6 4.00E+11 0.0 0.0
666. ac3h5+c2h3=ac3h4+c2h4 1.00E+12 0.0 0.0
667. ac3h5+o=acrol+h 6.03E+13 0.0 0.0
668. ac3h5+hco=c3h6+co 6.03E+13 0.0 0.0
669. ac3h5+ch2o=c3h6+hco 1.26E+08 1.9 18180.0
670. ac3h5+c2h3=c3h6+c2h2 4.82E+12 0.0 0.0
671. ac3h5+ac3h5=ac3h4+c3h6 8.43E+10 0.0 -260.0
672. ac3h5+c2h5=c2h4+c3h6 4.00E+11 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.94E+16 -1.3 52800.0
673. c3h5-aoo+ho2=c3h5-aooh+o2 3.37E+12 0.0 0.0
674. c3h5-aooh=c3h5o+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
675. sc3h5+o2=ch3hco+hco 4.34E+12 0.0 0.0
676. sc3h5+ho2=>ch2co+ch3+oh 4.50E+12 0.0 0.0
677. sc3h5+h=pc3h4+h2 4.00E+13 0.0 0.0
678. sc3h5+o=>ch2co+ch3 1.81E+14 0.0 0.0
679. sc3h5+ch3=pc3h4+ch4 1.00E+11 0.0 0.0
680. sc3h5+c2h5=pc3h4+c2h6 1.00E+11 0.0 0.0
681. sc3h5+c2h3=pc3h4+c2h4 1.00E+11 0.0 0.0
682. tc3h5+o2=>ch3co+ch2o 4.60E+16 -1.4 1010.0
683. tc3h5+ho2=>ch2co+ch3+oh 4.50E+12 0.0 0.0
684. tc3h5+o=>ch2co+ch3 1.81E+14 0.0 0.0
685. tc3h5+hco=>co+c3h6 9.00E+13 0.0 0.0
686. tc3h5+oh=>ch2co+ch3+h 5.00E+12 0.0 0.0
687. tc3h5+h=pc3h4+h2 1.00E+13 0.0 0.0
688. tc3h5+ch3=ac3h4+ch4 1.00E+11 0.0 0.0
689. tc3h5+ch3=pc3h4+ch4 1.00E+11 0.0 0.0
690. tc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6 1.00E+11 0.0 0.0
691. tc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4 1.00E+11 0.0 0.0
692. tc3h5+o2=ac3h4+ho2 1.89E+30 -5.6 15540.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.57E+31 -5.8 26610.0
693. c3h3+h=ac3h4 2.50E+12 0.0 0.0
694. ac3h4+o2=c3h3+ho2 4.00E+13 0.0 61500.0
695. ac3h4+ho2=>c3h4o2h 3.00E+11 0.0 8000.0
696. ac3h4+ho2=c3h3+h2o2 1.80E+13 0.0 19000.0
697. ac3h4+ho2=>ch2co+ch2+oh 5.00E+11 0.0 19000.0
698. ac3h4+ho2=acrol+oh 5.00E+11 0.0 19000.0
699. ac3h4+ho2=>c2h2+ch2o+oh 5.00E+11 0.0 19000.0
700. ac3h4+oh=c3h3+h2o 2.15E+12 0.0 -200.0
701. ac3h4+oh=ch2co+ch3 1.00E+12 0.0 -393.0
702. ac3h4+oh=hco+c2h4 1.25E+11 0.0 -393.0
703. ac3h4+oh=c2h5+co 1.88E+11 0.0 -393.0
704. ac3h4+oh=acrol+h 3.75E+11 0.0 -393.0
705. ac3h4+o=c2h4+co 1.12E-02 4.6 -4243.0
706. ac3h4+o=c2h3+hco 5.00E-04 4.6 -4243.0
707. ac3h4+o=ch2co+ch2 1.00E-03 4.6 -4243.0
708. ac3h4+o=c2h2+ch2o 2.50E-03 4.6 -4243.0
709. ac3h4+h=c3h3+h2 1.00E+12 0.0 1500.0
710. ac3h4+ch3=c3h3+ch4 2.00E+12 0.0 7700.0
711. ac3h4+c2h=c3h3+c2h2 1.00E+13 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.42E+16 -1.4 53820.0
712. ac3h4+ac3h4=c2h4+c4h4 1.00E+15 0.0 48000.0
713. c3h4o2h=>pc3h4+ho2 3.16E+11 0.0 19500.0
714. c3h4o2h=>ac3h4+ho2 3.16E+11 0.0 19500.0
715. c3h4o2h=>c3h4o+oh 3.16E+11 0.0 19500.0
716. c3h4o=>acrol 2.45E+14 0.0 58485.0
717. c3h4o+o2=>c3h3o+ho2 4.00E+13 0.0 61500.0
718. c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh 1.00E+12 0.0 14340.0
719. c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
720. c3h4o+oh=>c3h3o+h2o 4.79E+13 0.0 5955.0
721. c3h4o+h=>c3h3o+h2 2.00E+13 0.0 8300.0
722. c3h3o=>c2h3co 8.51E+14 0.0 14000.0
723. c3h3o+o2=>hcco+hco+oh 5.01E+12 0.0 19192.0
724. c3h3+h=pc3h4 1.50E+13 0.0 0.0
725. pc3h4=c2h+ch3 4.20E+16 0.0 100000.0
726. pc3h4+o2=c3h3+ho2 2.50E+12 0.0 51000.0
727. pc3h4+o2=>hcco+oh+ch2 4.00E+07 1.5 30100.0
728. pc3h4+ho2=>c2h4+co+oh 6.09E+09 0.0 7948.0
729. pc3h4+ho2=ch3co+ch2o 3.00E+12 0.0 16000.0
730. pc3h4+ho2=ch3hco+hco 4.50E+12 0.0 16000.0
731. pc3h4+ho2=c3h3+h2o2 5.00E+11 0.0 19000.0
732. pc3h4+oh=c3h3+h2o 1.40E+03 3.0 200.0
733. pc3h4+oh=ch2co+ch3 2.00E-04 4.5 -1000.0
734. pc3h4+oh=hco+c2h4 1.00E-04 4.5 -1000.0
735. pc3h4+oh=ch2o+c2h3 1.00E-04 4.5 -1000.0
736. pc3h4+oh=acrol+h 1.00E-04 4.5 -1000.0
737. pc3h4+o=ch2co+ch2 6.40E+12 0.0 2100.0
738. pc3h4+o=c2h3+hco 3.20E+12 0.0 2100.0
739. pc3h4+o=hcco+ch3 9.18E+12 0.0 2100.0
740. pc3h4+o=ch2o+c2h2 3.20E+11 0.0 2100.0
741. pc3h4+o=>hcco+ch2+h 3.20E+11 0.0 2010.0
742. pc3h4+h=c3h3+h2 1.00E+12 0.0 1500.0
743. pc3h4+ch3=c3h3+ch4 2.00E+12 0.0 7700.0
744. pc3h4+c2h3=c3h3+c2h4 1.00E+12 0.0 7700.0
745. pc3h4+c2h=c3h3+c2h2 4.20E+16 0.0 100000.0
746. pc3h4+o=c3h3+oh 7.65E+08 1.5 8600.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.18E+08 1.3 22470.0
747. c2h2+ch2=pc3h4 4.20E+12 0.0 6620.0
748. pc3h4+oh(+m)=>c3h4oh(+m) 2.29E+13 0.0 1808.0
Low pressure limit: 0.74440E+27 -0.31000E+01 0.18080E+04
TROE centering: 0.17000E+00 0.18000E+03 0.50000E+05 0.12772E+05
749. c3h4oh=>ch2co+ch3 3.00E+15 0.0 28000.0
750. c3h4oh=>hco+c2h4 5.00E+14 0.0 28000.0
751. c3h4oh=>ch2o+c2h3 1.00E+15 0.0 28000.0
752. c3h4oh=>acrol+h 5.00E+14 0.0 28000.0
753. c3h3+o2=ch2co+hco 3.01E+10 0.0 2870.0
754. c3h3+ho2=c3h2+h2o2 2.00E+12 0.0 0.0
755. c3h3+oh=c3h2+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
756. c3h3+oh=hcco+ch3 5.00E+12 0.0 0.0
757. c3h3+o=>c2h2+hco 1.38E+14 0.0 0.0
758. c3h3+o=c2h3+co 4.62E+13 0.0 0.0
759. c3h3+o=c2h+ch2o 4.62E+13 0.0 0.0
760. c3h3+o=>c2h2+co+h 4.62E+13 0.0 0.0
761. c3h3+h=c3h2+h2 5.00E+13 0.0 3000.0
762. c3h3+ch=ic4h3+h 7.00E+13 0.0 0.0
763. c3h3+ch=nc4h3+h 7.00E+13 0.0 0.0
764. c3h3+ch2=c4h4+h 4.00E+13 0.0 0.0
765. c3h3+ch3=c4h6 5.00E+12 0.0 0.0
766. c3h3+ch3(+M)=c4h612(+M) 1.50E+12 0.0 0.0
Low pressure limit: 0.26000E+58 -0.11940E+02 0.97700E+04
TROE centering: 0.17500E+00 0.13406E+04 0.60000E+05 0.97698E+04
h2 Enhanced by 2.000E+00
h2o Enhanced by 6.000E+00
ch4 Enhanced by 2.000E+00
co Enhanced by 1.500E+00
co2 Enhanced by 2.000E+00
c2h6 Enhanced by 3.000E+00
ar Enhanced by 7.000E-01
767. c3h3+hcco=c4h4+co 2.50E+13 0.0 0.0
768. c3h3+ch3=c2h5+c2h 4.56E+17 -1.1 48730.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.81E+13 0.0 0.0
769. c3h3+pc3h4=c6h6+h 2.20E+09 0.0 2000.0
770. ch3+c2h=c3h3+h 2.41E+13 0.0 0.0
771. c2h2+ch=c3h3 3.00E+13 0.0 0.0
772. ch+c2h2=c3h2+h 1.00E+14 0.0 0.0
773. c3h2+o2=hcco+hco 3.00E+10 0.0 2870.0
774. c3h2+oh=c2h2+hco 5.00E+13 0.0 0.0
775. c3h2+ch2=ic4h3+h 3.00E+13 0.0 0.0
776. c3h5o=acrol+h 1.00E+14 0.0 29100.0
777. c3h5o=c2h3+ch2o 2.03E+12 0.1 23560.0
778. c3h5o+o2=acrol+ho2 1.00E+12 0.0 6000.0
779. ethco=c2h5co+h 5.00E+15 0.0 85000.0
780. ethco=ch3chcho+h 5.00E+15 0.0 94990.0
781. ethco=ch2ch2hco+h 8.00E+15 0.0 98000.0
782. ethco=c2h5+hco 6.00E+14 0.0 79100.0
783. ethco=ch2hco+ch3 1.00E+17 0.0 84650.0
784. ethco+o2=c2h5co+ho2 3.01E+13 0.0 39150.0
785. ethco+o2=ch3chcho+ho2 3.97E+13 0.0 47690.0
786. ethco+o2=ch2ch2hco+ho2 1.98E+13 0.0 50870.0
787. ethco+h=c2h5co+h2 1.20E+14 0.0 7000.0
788. ethco+h=ch3chcho+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
789. ethco+h=ch2ch2hco+h2 9.50E+04 2.8 6280.0
790. ethco+o=c2h5co+oh 5.85E+12 0.0 1808.0
791. ethco+o=ch3chcho+oh 4.77E+04 2.7 2106.0
792. ethco+o=ch2ch2hco+oh 9.50E+04 2.7 3716.0
793. ethco+oh=c2h5co+h2o 2.35E+10 0.7 -1113.0
794. ethco+oh=ch3chcho+h2o 4.68E+07 1.6 -35.0
795. ethco+oh=ch2ch2hco+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
796. ethco+ho2=c2h5co+h2o2 3.10E+12 0.0 11920.0
797. ethco+ho2=ch3chcho+h2o2 5.60E+12 0.0 17690.0
798. ethco+ho2=ch2ch2hco+h2o2 8.50E+12 0.0 20440.0
799. ethco+ch3=c2h5co+ch4 1.70E+12 0.0 8440.0
800. ethco+ch3=ch3chcho+ch4 2.70E+04 2.3 7287.0
801. ethco+ch3=ch2ch2hco+ch4 4.50E-02 3.6 7154.0
802. ethco+hco=c2h5co+ch2o 1.70E+12 0.0 8440.0
803. ethco+ch3o=c2h5co+ch3oh 1.15E+11 0.0 1280.0
804. ethco+ch3o2=c2h5co+ch3o2h 1.00E+12 0.0 9500.0
805. ethco+c2h5=c2h5co+c2h6 1.70E+12 0.0 8440.0
806. ethco+c2h3=c2h5co+c2h4 1.70E+12 0.0 8440.0
807. c2h5co+m=c2h5+co+m 8.64E+15 0.0 14400.0
808. ch2ch2hco=c2h4+hco 8.25E+12 -0.2 21900.0
809. acrol=c2h4+co 3.90E+14 0.0 69000.0
810. acrol+o=oh+c2h3co 5.01E+12 0.0 1790.0
811. acrol+h=h2+c2h3co 4.00E+13 0.0 4200.0
812. acrol+oh=h2o+c2h3co 4.20E+12 0.0 500.0
813. acrol+ho2=h2o2+c2h3co 1.00E+12 0.0 10000.0
814. acrol+ch3=ch4+c2h3co 2.00E-06 5.6 2500.0
815. acrol+c2h5=c2h3co+c2h6 5.01E+10 0.0 6280.0
816. acrol+c2h3=c2h4+c2h3co 1.74E+12 0.0 8440.0
817. acrol+h=ch3chcho 1.32E+13 0.0 1560.0
818. acrol+h=ch2ch2hco 1.32E+13 0.0 3260.0
819. c2h3co+m=>c2h3+co+m 8.60E+15 0.0 23000.0
h2o Enhanced by 1.625E+01
co Enhanced by 1.875E+00
co2 Enhanced by 3.750E+00
ch4 Enhanced by 1.625E+01
c2h6 Enhanced by 1.625E+01
820. c2h3co+ho2=c2h3+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
821. c2h3+ch3co=ch3+c2h3co 1.81E+13 0.0 0.0
822. c2h3+hco=acrol 1.80E+13 0.0 0.0
823. aceton(+M)=ch3co+ch3(+M) 7.11E+21 -1.6 84680.0
Low pressure limit: 0.70130E+90 -0.20380E+02 0.10715E+06
TROE centering: 0.86303E+00 0.99995E+10 0.41640E+03 0.32899E+10
824. aceton+o2=ch2coch3+ho2 6.03E+13 0.0 48500.0
825. aceton+o=ch2coch3+oh 5.13E+11 0.2 4890.0
826. aceton+h=ch2coch3+h2 9.80E+05 2.4 5160.0
827. aceton+oh=ch2coch3+h2o 3.44E+05 2.4 815.0
828. aceton+ho2=ch2coch3+h2o2 1.70E+13 0.0 20460.0
829. aceton+ch3=ch2coch3+ch4 3.96E+11 0.0 9784.0
830. ch2coch3=ch2co+ch3 1.00E+13 0.0 28000.0
831. ch2coch3+o2=ch3coch2o2 9.00E+18 -2.5 0.0
832. ch3coch2o2+ho2=c3ket21+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
833. ch3coch2o2+h2o2=c3ket21+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
834. ch3coch2o2+ho2=>ch3coch2o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
835. ch3coch2o2+ch3o2=>ch3coch2o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
836. ch3coch2o=ch2o+ch3co 3.73E+20 -2.2 17260.0
837. ch3coch2o+o2=ch3cocho+ho2 8.43E+09 0.0 220.0
838. ch3coco+o2=co2+co2+ch3 3.00E+10 0.0 2870.0
839. ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co 2.00E+13 0.0 0.0
840. ch3co+hco=ch3cocho 1.00E+13 0.0 0.0
841. ch3cocho+h=ch3coco+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
842. ch3cocho+oh=ch3coco+h2o 2.69E+10 0.8 -340.0
843. ch3cocho+o=ch3coco+oh 5.00E+12 0.0 1790.0
844. ch3cocho+ch3=ch3coco+ch4 1.70E+12 0.0 8440.0
845. ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2 2.80E+12 0.0 13600.0
846. ch3co+co=ch3coco 1.50E+11 0.0 3000.0
847. ch2cco+h=c2h3co 8.00E+11 0.0 2000.0
848. ch2cco+oh=>hccco+h2o 2.20E+06 2.0 2780.0
849. ch2cco+h=>hccco+h2 8.20E+05 2.5 12280.0
850. hccco+o2=>hco+co+co 4.60E+16 -1.4 1010.0
851. hcoch2hco+o2=hcoch2co+ho2 4.00E+13 0.5 42200.0
852. hcoch2hco+oh=hcoch2co+h2o 5.40E+10 0.8 -340.0
853. hcoch2hco+h=hcoch2co+h2 8.00E+13 0.0 4200.0
854. hcoch2hco+o=hcoch2co+oh 1.00E+13 0.0 1790.0
855. hcoch2hco+ho2=hcoch2co+h2o2 5.60E+12 0.0 13600.0
856. hcoch2hco+ch3o=hcoch2co+ch3oh 2.30E+11 0.0 1280.0
857. hcoch2hco+ch3o2=hcoch2co+ch3o2h 2.00E+12 0.0 9500.0
858. hcoch2co=>ch2hco+co 1.83E+15 -0.7 12910.0
859. ch2chchco+h=cjhchchco+h2 4.21E-03 4.6 2583.0

```
860. ch2chchco+oh=cjhchchco+h2o                  1.01E+13    0.0     5955.0
861. ch2chchco+ch3=cjhchchco+ch4                 3.31E+00    3.7     9500.0
862. ch2chchco+o=cjhchchco+oh                    1.20E+11    0.7     8959.0
863. ch2chchco+ho2=cjhchchco+h2o2                8.50E+13    0.0    30430.0
864. ch2chchco+h=co+ac3h5                        1.10E+13    0.0     3400.0
865. ch2chchco+h=c2h4+hcco                       1.10E+13    0.0     3400.0
866. c2h2+hcco=cjhchchco                         1.61E+40   -8.6    20331.0
867. c2h3+hcco=ch2chchco                         8.00E+12    0.0        0.0
868. ch3+c2h3co=c2h5chco                         1.00E+13    0.0        0.0
869. c4ald3oxo+o2=mecomeco+ho2                   2.00E+13    0.5    42200.0
870. c4ald3oxo+oh=mecomeco+h2o                   2.69E+10    0.8     -340.0
871. c4ald3oxo+h=mecomeco+h2                     4.00E+13    0.0     4200.0
872. c4ald3oxo+o=mecomeco+oh                     5.00E+12    0.0     1790.0
873. c4ald3oxo+ho2=mecomeco+h2o2                 2.80E+12    0.0    13600.0
874. c4ald3oxo+ch3o=mecomeco+ch3oh               1.15E+11    0.0     1280.0
875. c4ald3oxo+ch3o2=mecomeco+ch3o2h             1.00E+12    0.0     9500.0
876. mecomeco=>ch2cooh3+co                       1.83E+15   -0.7    12910.0
877. c4ald2oxo+o2=c2h5coco+ho2                   2.00E+13    0.5    42200.0
878. c4ald2oxo+oh=c2h5coco+h2o                   2.69E+10    0.8     -340.0
879. c4ald2oxo+h=c2h5coco+h2                     4.00E+13    0.0     4200.0
880. c4ald2oxo+o=c2h5coco+oh                     5.00E+12    0.0     1790.0
881. c4ald2oxo+ho2=c2h5coco+h2o2                 2.80E+12    0.0    13600.0
882. c4ald2oxo+ch3o=c2h5coco+ch3oh               1.15E+11    0.0     1280.0
883. c4ald2oxo+ch3o2=c2h5coco+ch3o2h             1.00E+12    0.0     9500.0
884. c2h5coco=>c2h5co+co                         1.83E+15   -0.7    12910.0
885. c4h10=pc4h9+h                               1.58E+16    0.0    97970.0
886. c4h10=sc4h9+h                               1.00E+16    0.0    94990.0
887. c4h10=nc3h7+ch3                             7.90E+22   -1.8    88630.0
888. c4h10=c2h5+c2h5                             1.58E+17    0.0    87040.0
889. c4h10+o2=pc4h9+ho2                          3.97E+13    0.0    50870.0
890. c4h10+o2=sc4h9+ho2                          7.94E+13    0.0    47690.0
891. c4h10+h=pc4h9+h2                            1.88E+05    2.8     6280.0
892. c4h10+h=sc4h9+h2                            2.60E+06    2.4     4471.0
893. c4h10+o=pc4h9+oh                            1.93E+05    2.7     3716.0
894. c4h10+o=sc4h9+oh                            9.54E+04    2.7     2106.0
895. c4h10+oh=pc4h9+h2o                          1.05E+10    1.0     1590.0
896. c4h10+oh=sc4h9+h2o                          9.36E+07    1.6      -35.0
897. c4h10+ho2=pc4h9+h2o2                        1.68E+13    0.0    20440.0
898. c4h10+ho2=sc4h9+h2o2                        1.12E+13    0.0    17690.0
899. c4h10+ch3=pc4h9+ch4                         9.04E-01    3.6     7154.0
900. c4h10+ch3=sc4h9+ch4                         5.41E+04    2.3     7287.0
901. c4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh                      3.16E+11    0.0     7000.0
902. c4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh                      2.19E+11    0.0     5000.0
903. c4h10+ch3o2=pc4h9+ch3o2h                    1.68E+13    0.0    20440.0
904. c4h10+ch3o2=sc4h9+ch3o2h                    1.12E+13    0.0    17690.0
905. c4h10+c2h3=pc4h9+c2h4                       1.02E+12    0.0    18000.0
906. c4h10+c2h3=sc4h9+c2h4                       8.00E+11    0.0    16800.0
907. c4h10+c2h5=pc4h9+c2h6                       1.02E+11    0.0    13400.0
908. c4h10+c2h5=sc4h9+c2h6                       1.00E+11    0.0    10400.0
909. pc4h9=sc4h9                                 3.80E+10    0.7    36600.0
910. pc4h9=c2h5+c2h4                             3.58E+12    0.5    29480.0
911. pc4h9=c4h8+h                                2.65E+12    0.2    35710.0
912. pc4h9+o2=c4h8+ho2                           3.70E+16   -1.6     3420.0
913. pc4h9+ho2=c4h8+h2o2                         2.41E+13    0.0        0.0
914. pc4h9+oh=c4h8+h2o                           2.40E+13    0.0        0.0
915. pc4h9+h=c4h8+h2                             1.25E+13    0.0        0.0
916. pc4h9+ch3=c4h8+ch4                          2.00E+12    0.0        0.0
```

```
917. pc4h9+c2h5=c4h8+c2h6                        1.60E+12    0.0        0.0
918. pc4h9+ac3h5=c4h8+c3h6                       1.00E+12    0.0        0.0
919. pc4h9+Cc4h7-1=c4h8+c4h8                     1.00E+12    0.0        0.0
920. sc4h9+o=butanone+h                          4.82E+13    0.0        0.0
921. sc4h9+o=ch3hco+c2h5                         4.82E+13    0.0        0.0
922. pc4h9+o=ch2o+nc3h7                          4.82E+13    0.0        0.0
923. pc4h9+o=nc3h7hco+h                          4.82E+13    0.0        0.0
924. sc4h9=c3h6+ch3                              4.79E+10    1.0    30360.0
925. sc4h9=c4h8+h                                2.99E+11    0.6    36820.0
926. sc4h9=t2c4h8+h                              2.85E+11    0.3    35520.0
927. sc4h9=c2c4h8+h                              2.85E+11    0.3    35520.0
928. sc4h9+o2=c4h8+ho2                           3.35E+20   -3.0     2500.0
929. sc4h9+o2=t2c4h8+ho2                         1.85E+16   -1.6     3420.0
930. sc4h9+o2=c2c4h8+ho2                         1.85E+16   -1.6     3420.0
931. sc4h9+ho2=c4h8+h2o2                         2.40E+13    0.0        0.0
932. sc4h9+ho2=t2c4h8+h2o2                       2.40E+13    0.0        0.0
933. sc4h9+ho2=c2c4h8+h2o2                       2.40E+13    0.0        0.0
934. sc4h9+oh=c4h8+h2o                           2.40E+13    0.0        0.0
935. sc4h9+oh=t2c4h8+h2o                         2.40E+13    0.0        0.0
936. sc4h9+oh=c2c4h8+h2o                         2.40E+13    0.0        0.0
937. sc4h9+h=c4h8+h2                             5.00E+13    0.0        0.0
938. sc4h9+h=t2c4h8+h2                           5.00E+13    0.0        0.0
939. sc4h9+h=c2c4h8+h2                           5.00E+13    0.0        0.0
940. sc4h9+ch3=c4h8+ch4                          1.00E+12    0.0        0.0
941. sc4h9+ch3=t2c4h8+ch4                        1.00E+12    0.0        0.0
942. sc4h9+ch3=c2c4h8+ch4                        1.00E+12    0.0        0.0
943. c2c4h8=t2c4h8                               3.98E+13    0.0    62000.0
944. c2c4h8=c4h6+h2                              1.00E+13    0.0    65500.0
945. c2c4h8=Cc4h7-1+h                            1.06E+85  -20.0   132787.0
946. c2c4h8=ac3h5+ch3                            3.75E+66  -15.6    97300.0
947. sc3h5+ch3(+m)=c2c4h8(+m)                    2.50E+13    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.42700E+59 -0.11940E+02  0.97698E+04
   TROE centering:      0.17500E+00  0.13406E+04  0.60000E+05  0.10140E+05
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      c2h2              Enhanced by    3.000E+00
      c2h4              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
948. c2c4h8+h=Cc4h7-1+h2                         1.00E+13    0.0     3500.0
949. c2c4h8+o=Cc4h7-1+oh                         3.48E+11    0.7     5900.0
950. c2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o                       9.00E+06    2.0      -60.0
951. c2c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2                     1.92E+04    2.6    13900.0
952. c2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4                      1.00E+11    0.0     8200.0
953. c2c4h8+o=ch3co+c2h5                         2.17E+05    2.3    -1050.0
954. c2c4h8+o=ch3chcho+ch3                       1.81E+05    2.3    -1050.0
955. c2c4h8+o=ch3hco+c2h4                        3.25E+05    2.3    -1050.0
956. c2c4h8+h=c3h6+ch3                           3.46E+17   -1.1     6461.0
957. c2c4h8+Cc4h7-1=c4h8+Cc4h7-1                 3.98E+13    0.0    15800.0
958. c2c4h8+Cc4h7-1=t2c4h8+Cc4h7-1               3.98E+13    0.0    15800.0
959. c2c4h8+h=c4h722+h2                          8.20E+05    2.5     9790.0
960. c2c4h8+o=c4h722+oh                          1.20E+11    0.7     7630.0
961. c2c4h8+oh=c4h722+h2o                        2.20E+06    2.0     1450.0
962. c2c4h8+ch3=c4h722+ch4                       1.96E+00    3.5    11700.0
```

```
963. c2c4h8+ho2=c4h8cy2o3+oh                     1.02E+12    0.0    14964.0
964. t2c4h8=Cc4h7-1+h                            1.06E+85  -20.0   132787.0
965. t2c4h8=ac3h5+ch3                            3.75E+66  -15.6    97300.0
966. sc3h5+ch3(+m)=t2c4h8(+m)                    2.50E+13    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.42700E+59 -0.11940E+02  0.97698E+04
   TROE centering:      0.17500E+00  0.13406E+04  0.60000E+05  0.10140E+05
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      c2h2              Enhanced by    3.000E+00
      c2h4              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
967. sc4h9+Cc4h7-1=t2c4h8+t2c4h8                 4.33E+14   -0.8     -130.0
968. sc4h9+Cc4h7-1=c2c4h8+t2c4h8                 4.33E+14   -0.8     -130.0
969. sc4h9+Cc4h7-1=c2c4h8+c2c4h8                 4.33E+14   -0.8     -130.0
970. t2c4h8+h=Cc4h7-1+h2                         5.00E+12    0.0     3500.0
971. t2c4h8+o=Cc4h7-1+oh                         3.48E+11    0.7     5900.0
972. t2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o                       9.00E+06    2.0      -60.0
973. t2c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2                     1.92E+04    2.6    13900.0
974. t2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4                      1.00E+11    0.0     8200.0
975. t2c4h8+o=ch3co+c2h5                         2.17E+05    2.3    -1050.0
976. t2c4h8+o=ch3chcho+ch3                       1.81E+05    2.3    -1050.0
977. t2c4h8+o=ch3hco+c2h4                        3.25E+05    2.3    -1050.0
978. t2c4h8+h=c3h6+ch3                           3.46E+17   -1.1     6461.0
979. t2c4h8+Cc4h7-1=c4h8+Cc4h7-1                 3.98E+13    0.0    15800.0
980. t2c4h8+h=c4h722+h2                          8.20E+05    2.5     9790.0
981. t2c4h8+o=c4h722+oh                          1.20E+11    0.7     7630.0
982. t2c4h8+oh=c4h722+h2o                        2.20E+06    2.0     1450.0
983. t2c4h8+ch3=c4h722+ch4                       1.96E+00    3.5    11700.0
984. t2c4h8+ho2=c4h8cy2o3+oh                     1.02E+12    0.0    14964.0
985. Cc4h7-1+h(+M)=c4h8(+M)                      2.00E+14    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.26600E+61 -0.12000E+02  0.59678E+04
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
986. ac3h5+ch3(+M)=c4h8(+M)                      1.00E+14   -0.3     -262.3
   Low pressure limit:  0.39100E+61 -0.12810E+02  0.62500E+04
   TROE centering:      0.10400E+00  0.16060E+04  0.60000E+05  0.61184E+04
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
987. c2h3+c2h5(+M)=c4h8(+M)                      1.50E+13    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.15500E+57 -0.11790E+02  0.89845E+04
   TROE centering:      0.19800E+00  0.22780E+04  0.60000E+05  0.57232E+04
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
```

```
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      c2h6              Enhanced by    3.000E+00
      ar                Enhanced by    7.000E-01
988. c4h8=c4h6+h2                                3.00E+13    0.0    65500.0
989. c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2                       6.40E+03    2.6    12400.0
990. c4h8+ho2=Dc4h7-1+h2o2                       6.00E+11    0.0    17000.0
991. c4h8+ho2=c4h8cy1o2+oh                       1.02E+12    0.0    14964.0
992. c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o                         3.00E+06    2.0    -1520.0
993. c4h8+oh=Dc4h7-1+h2o                         2.67E+06    2.0      450.0
994. c4h8+oh=c4h712+h2o                          1.10E+06    2.0     1450.0
995. c4h8+oh=Ac4h7-1+h2o                         2.20E+06    2.0     2780.0
996. c4h8+o=c3h6+ch2o                            2.50E+12    0.0        0.0
997. c4h8+o=ch3hco+c2h4                          1.25E+13    0.0      850.0
998. c4h8+o=c2h5+ch3+co                          1.62E+13    0.0      850.0
999. c4h8+o=Cc4h7-1+oh                           8.80E+10    0.7     3250.0
1000. c4h8+o=Dc4h7-1+oh                          5.10E+13    0.0     7850.0
1001. c4h8+o=c4h712+oh                           6.00E+10    0.7     7630.0
1002. c4h8+o=Ac4h7-1+oh                          1.20E+11    0.7     8960.0
1003. c4h8+h=Cc4h7-1+h2                          5.40E+04    2.5    -1900.0
1004. c4h8+h=Dc4h7-1+h2                          2.85E+07    2.0     7700.0
1005. c4h8+h=c4h712+h2                           4.10E+05    2.5     9790.0
1006. c4h8+h=Ac4h7-1+h2                          8.20E+05    2.5    12280.0
1007. c4h8+ch3=Dc4h7-1+ch4                       1.00E+11    0.0     7300.0
1008. c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4                       1.00E+11    0.0     7300.0
1009. c4h8+ch3=c4h712+ch4                        9.80E-01    3.5    11700.0
1010. c4h8+ch3=Ac4h7-1+ch4                       1.38E+00    3.5    12900.0
1011. c4h8+c2h3=Cc4h7-1+c2h4                     7.20E+11    0.0     5008.0
1012. c4h8+c2h5=Cc4h7-1+c2h6                     1.00E+11    0.0     8300.0
1013. c4h8+ac3h5=Cc4h7-1+c3h6                    8.00E+10    0.0    12400.0
1014. c4h8+sc3h5=Cc4h7-1+c3h6                    8.00E+10    0.0    12400.0
1015. c4h8+tc3h5=Cc4h7-1+c3h6                    8.00E+10    0.0    12400.0
1016. c4h8+h=c3h6+ch3                            3.20E+22   -2.4    11180.0
1017. c4h8+h=c2h4+c2h5                           8.80E+16   -1.1     6461.0
1018. Dc4h7-1=c2h4+c2h3                          5.00E+13    0.0    38000.0
1019. Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2                        1.02E+12    0.0    22654.0
1020. Dc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2                      1.80E+12    0.0        0.0
1021. Dc4h7-1+ho2=>ac3h5+ch2o+oh                 1.00E+12    0.0        0.0
1022. Dc4h7-1+oh=c4h6+h2o                        4.00E+13    0.0        0.0
1023. Dc4h7-1+o=c4h6+oh                          4.00E+13    0.0        0.0
1024. Dc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4                     4.00E+12    0.0        0.0
1025. Dc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6                     4.00E+12    0.0        0.0
1026. Dc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4                     5.00E+11    0.0        0.0
1027. Dc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4                    4.00E+12    0.0        0.0
1028. Dc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4                    4.00E+12    0.0        0.0
1029. Dc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6                    6.30E+12    0.0        0.0
1030. Dc4h7-1+Dc4h7-1=c4h6+c4h8                  3.16E+12    0.0        0.0
1031. Dc4h7-1+c2h6=c4h8+c2h5                     3.00E+13    0.0    12300.0
1032. Dc4h7-1+c2h4=c4h8+c2h3                     1.00E+11    0.0    15000.0
1033. Dc4h7-1+c3h6=c4h8+ac3h5                    1.00E+11    0.0     9800.0
1034. Dc4h7-1+c4h8=c4h8+Cc4h7-1                  1.00E+11    0.0     8300.0
1035. Dc4h7-1+h(+M)=c4h8(+M)                     3.60E+13    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.30100E+49 -0.93200E+01  0.58336E+04
   TROE centering:      0.49800E+00  0.13140E+04  0.13140E+04  0.50000E+05
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
```

```
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      ar              Enhanced by    7.000E-01
1036. Dc4h7-1+h=ch3+ac3h5                       2.00E+21   -2.0    11000.0
1037. Dc4h7-1+h=c4h6+h2                         1.80E+12    0.0        0.0
1038. Dc4h7-1+hco=c4h8+co                       6.00E+13    0.0        0.0
1039. Dc4h7-1+ch3=c4h6+ch4                      1.10E+13    0.0        0.0
1040. c4h6+Dc4h7-1=nc4h5+c4h8                   6.32E+02    3.1    20010.0
1041. c4h6+Dc4h7-1=ic4h5+c4h8                   6.32E+02    3.1    18010.0
1042. Cc4h7-1(+M)=c4h6+h(+M)                    4.70E+08    1.3    44697.6
    Low pressure limit:  0.46000E-36  0.15370E+02 -0.60310E+03
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
1043. Cc4h7-1+o2=c4h6+ho2                       2.00E+09    0.0    -1506.0
1044. Cc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2                     1.00E+12    0.0        0.0
1045. Cc4h7-1+ho2=>acrol+ch3+oh                 7.00E+12    0.0    -1000.0
1046. Cc4h7-1+ho2=>c2h3+ch3hco+oh               7.00E+12    0.0    -1000.0
1047. Cc4h7-1+ho2=>ch2o+sc3h5+oh                7.00E+12    0.0    -1000.0
1048. Cc4h7-1+oh=c4h6+h2o                       6.00E+12    0.0        0.0
1049. Cc4h7-1+oh=c4h612+h2o                     6.00E+12    0.0        0.0
1050. Cc4h7-1+o=c4h6+oh                         4.00E+13    0.0        0.0
1051. Cc4h7-1+o=acrol+ch3                       6.03E+13    0.0        0.0
1052. Cc4h7-1+h=c4h6+h2                         1.80E+13    0.0        0.0
1053. Cc4h7-1+h=c4h612+h2                       1.80E+13    0.0        0.0
1054. Dc4h7-1+h=Cc4h7-1+h                       1.00E+13    0.0        0.0
1055. Cc4h7-1+ch3=c4h6+ch4                      1.00E+13    0.0        0.0
1056. Cc4h7-1+ch3=c4h612+ch4                    1.00E+13    0.0        0.0
1057. Cc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4                    1.00E+13    0.0        0.0
1058. Cc4h7-1+c2h3=c4h612+c2h4                  1.00E+13    0.0        0.0
1059. Cc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6                    4.00E+12    0.0        0.0
1060. Cc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4                    5.00E+11    0.0        0.0
1061. Cc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4                   4.00E+12    0.0        0.0
1062. Cc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4                   4.00E+12    0.0        0.0
1063. Cc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6                   6.30E+12    0.0        0.0
1064. Cc4h7-1+ac3h5=c4h8+ac3h4                  1.00E+12    0.0        0.0
1065. Cc4h7-1+Cc4h7-1=c4h6+c4h8                 3.00E+12    0.0        0.0
1066. ac3h4+ch3=c4h712                          2.00E+11    0.0     8110.0
1067. c4h712=butyne+h                           4.00E+12    0.0    38000.0
1068. c4h712+o2=>c2h5co+ch2o                    4.60E+16   -1.4     1010.0
1069. c4h722=pc3h4+ch3                          2.00E+13    0.0    31500.0
1070. Ac4h7-1=c2h2+c2h5                         2.00E+13    0.0    33000.0
1071. Ac4h7-1+o2=>hco+ethco                     4.60E+16   -1.4     1010.0
1072. Ac4h7-1+ch2o=c4h8+hco                     5.42E+03    2.8     5862.0
1073. c3h3+ch3=butyne                           5.00E+12    0.0        0.0
1074. butyne+ho2=nc4h5+h2o2                     5.00E+11    0.0    17000.0
1075. butyne+ho2=ic4h5+h2o2                     5.00E+11    0.0    17000.0
1076. butyne+oh=nc4h5+h2o                       2.60E+02    3.0      200.0
1077. butyne+oh=ic4h5+h2o                       2.60E+02    3.0      200.0
1078. butyne+oh=ch2co+c2h5                      4.00E-04    4.5    -1000.0
1079. butyne+o=c3h6+co                          2.00E+13    0.0     1660.0
1080. butyne+h=ac3h4+ch3                        1.30E+05    2.5     1000.0
1081. butyne+h=c2h5+c2h2                        6.50E+04    2.5     1000.0
1082. butyne+h=ic4h5+h2                         6.50E+13    0.0     9400.0
1083. butyne+h=nc4h5+h2                         6.50E+13    0.0     9400.0
1084. butyne+ch3=ic4h5+ch4                      1.00E+14    0.0    19500.0
1085. butyne+ch3=nc4h5+ch4                      1.00E+14    0.0    19500.0
1086. butyne=c4h612                             2.50E+13    0.0    65000.0
1087. butyn2=c4h6                               3.00E+13    0.0    65000.0
1088. butyn2=c4h612                             3.00E+13    0.0    67000.0
1089. butyn2+h=c4h612+h                         2.00E+13    0.0     4000.0
1090. butyn2+h=c4h5-2+h2                        3.40E+05    2.5     2490.0
1091. butyn2+h=pc3h4+ch3                        2.60E+05    2.5     1000.0
1092. butyn2=c4h5-2+h                           5.00E+15    0.0    87300.0
1093. butyn2+ch3=c4h5-2+ch4                     1.40E+14    0.0    18500.0
1094. c4h5-2=ic4h5                              1.50E+67  -16.9    59100.0
1095. ic4h5+h=c4h5-2+h                          3.10E+26   -3.4    17423.0
1096. c4h5-2+ho2=oh+c2h2+ch3co                  8.00E+11    0.0        0.0
1097. c4h5-2+o2=ch3co+ch2co                     2.16E+10    0.0     2500.0
1098. c4h5-2+c2h2=c6h6+h                        5.00E+14    0.0    25000.0
1099. c4h5-2+c2h4=CPD+ch3                       5.00E+14    0.0    25000.0
1100. c4h612=c4h6                               2.50E+13    0.0    63000.0
1101. c4h612+h=ac3h4+ch3                        2.00E+13    0.0     2000.0
1102. c4h612+h=pc3h4+ch3                        2.00E+13    0.0     2000.0
1103. c4h612=ic4h5+h                            4.20E+15    0.0    92600.0
1104. c4h612+h=c4h6+h                           2.00E+13    0.0     4000.0
1105. c4h612+h=ic4h5+h2                         1.70E+05    2.5     2490.0
1106. c4h612+ch3=ic4h5+ch4                      7.00E+13    0.0    18500.0
1107. c4h612+o=ch2co+c2h4                       1.20E+08    1.6      327.0
1108. c4h612+o=ic4h5+oh                         1.80E+11    0.7     5880.0
1109. c4h612+oh=ic4h5+h2o                       3.10E+06    2.0     -298.0
1110. c4h6+h=nc4h5+h2                           1.33E+06    2.5    12240.0
1111. c4h6+h=ic4h5+h2                           6.65E+05    2.5     9240.0
1112. c4h6+o=nc4h5+oh                           7.50E+06    1.9     3740.0
1113. c4h6+o=ic4h5+oh                           7.50E+06    1.9     3740.0
1114. c4h6+o=sc3h5co+h                          1.50E+08    1.4     -860.0
1115. c4h6+o=c2h3chcho+h                        4.50E+08    1.4     -860.0
1116. c4h6+oh=nc4h5+h2o                         6.20E+06    2.0     3430.0
1117. c4h6+oh=ic4h5+h2o                         3.10E+06    2.0      430.0
1118. c4h6+ch3=nc4h5+ch4                        2.00E+14    0.0    22800.0
1119. c4h6+ch3=ic4h5+ch4                        1.00E+14    0.0    19800.0
1120. c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4                      5.00E+13    0.0    22800.0
1121. c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4                      2.50E+13    0.0    19800.0
1122. c4h6+c3h3=nc4h5+ac3h4                     1.00E+13    0.0    22500.0
1123. c4h6+c3h3=ic4h5+ac3h4                     5.00E+12    0.0    19500.0
1124. c4h6+ac3h5=nc4h5+c3h6                     1.00E+13    0.0    22500.0
1125. c4h6+ac3h5=ic4h5+c3h6                     5.00E+12    0.0    19500.0
1126. c4h6+h=pc3h4+ch3                          2.00E+12    0.0     7000.0
1127. c4h6+h=ac3h4+ch3                          2.00E+12    0.0     7000.0
1128. acrol+c2h3=c4h6+hco                       2.80E+21   -2.4    14720.0
1129. c4h6=c4h4+h2                              2.50E+15    0.0    94700.0
1130. c4h6+c2h3=c6h6+h2+h                       5.62E+11    0.0     3240.0
1131. c4h6+ho2=c4h6o25+oh                       1.20E+12    0.0    14000.0
1132. c4h6+ho2=c2h3choch2+oh                    4.80E+12    0.0    14000.0
1133. c2h3choch2=c4h6o23                        2.00E+14    0.0    50600.0
1134. c4h6o23=sc3h5cho                          1.95E+13    0.0    49400.0
1135. c4h6o23=c2h4+ch2co                        5.75E+15    0.0    69300.0
1136. c4h6o23=c2h2+c2h4o                        1.00E+16    0.0    75800.0
1137. c4h6o25=c4h4o+h2                          5.30E+12    0.0    48500.0
1138. c4h4o=co+pc3h4                            1.78E+15    0.0    77500.0
1139. c4h4o=c2h2+ch2co                          5.01E+14    0.0    77500.0
1140. c4h6+oh=hoc4h6                            1.84E+12    0.0    -1170.0
    Declared duplicate reaction...
1141. c4h6+oh=hoc4h6                            5.70E+12    0.0     -570.0
    Declared duplicate reaction...
1142. hoc4h6=>c2h3choch2+h                      5.00E+15    0.0    28000.0
1143. hoc4h6+o2=acrol+ch2o+oh                   1.00E+09    0.0       30.0
1144. c4h6+o=>c2h3choch2                        3.00E+13    0.0       80.0
1145. c2h3choch2=>c3h6+co                       2.00E+13    0.0    57000.0
1146. c2h3choch2=>c2h4+ch2co                    5.00E+14    1.0    78000.0
1147. c2h3choch2+o=>ch2hco+ch2hco               1.20E+08    1.4      530.0
1148. c2h3choch2+oh=>ch2co+c2h3+h2o             2.02E+13    0.0     5955.0
1149. c2h3choch2+ho2=>ch2hco+ch2hco+oh          1.00E+12    0.0    14964.0
1150. c2h3choch2+h=>c4h5o+h2                    4.10E+09    1.2     2405.0
1151. c2h3choch2+oh=>c4h5o+h2o                  2.35E+10    0.7    -1113.0
1152. c2h3choch2+ho2=>c4h5o+h2o2                1.70E+12    0.0    10700.0
1153. c2h3choch2+o=>c4h5o+oh                    5.85E+12    0.0     1808.0
1154. c2h3choch2+ch3=>c4h5o+ch4                 1.70E+12    0.0     8440.0
1155. c2h3choch2+c2h3=>c4h5o+c2h4               1.70E+12    0.0     8440.0
1156. c2h3choch2+ac3h5=>c4h5o+c3h6              1.70E+12    0.0     8440.0
1157. c4h6+ho2=>c4h6o2h                         2.00E+11    0.0     8000.0
1158. c4h6o2h=>acrol+oh+ch2                     1.00E+10    0.0    19500.0
1159. c4h6o2h=>c2h3choch2+oh                    2.00E+11    0.0    19500.0
1160. c4h5o+h=>c2h3choch2                       5.00E+12    0.0        0.0
1161. c4h5o+o2=>acrol+co+oh                     1.00E+12    0.0    25000.0
1162. c4h5o=>ch2co+c2h3                         1.00E+15    0.0    65000.0
1163. c4h5o=>co+c2h2+ch3                        1.00E+15    0.0    65000.0
1164. c4h5o=>co+ac3h5                           5.00E+14    0.0    60000.0
1165. ic4h5+h=c4h4+h2                           3.00E+13    0.0        0.0
1166. ic4h5+h=c3h3+ch3                          2.00E+13    0.0     2000.0
1167. ic4h5+oh=c4h4+h2o                         4.00E+12    0.0        0.0
1168. ic4h5+hco=c4h6+co                         5.00E+12    0.0        0.0
1169. ic4h5+ho2=c4h6+o2                         6.00E+11    0.0        0.0
1170. ic4h5+ho2=ch2co+c2h3+oh                   6.60E+12    0.0        0.0
1171. ic4h5+h2o2=c4h6+ho2                       1.21E+10    0.0     -596.0
1172. ic4h5+o2=ch2co+ch2hco                     2.16E+10    0.0     2500.0
1173. ic4h5+o2=c2h3co+ch2o                      2.00E+11    0.0    14000.0
1174. ic4h5+o=>ch2co+c2h3                       1.00E+13    0.0     2000.0
1175. ic4h5+ch2o=c4h6+hco                       4.00E+12    0.0     8840.0
1176. nc4h5+o=>ac3h5+co                         1.00E+13    0.0     2000.0
1177. nc4h5+ch2o=c4h6+hco                       4.00E+12    0.0     8840.0
1178. nc4h5+h=c4h4+h2                           1.50E+13    0.0        0.0
1179. nc4h5+oh=c4h4+h2o                         2.00E+12    0.0        0.0
1180. nc4h5+hco=c4h6+co                         5.00E+12    0.0        0.0
1181. nc4h5+ho2=c2h3+ch2co+oh                   6.60E+12    0.0        0.0
1182. nc4h5+h2o2=c4h6+ho2                       1.21E+10    0.0     -596.0
1183. nc4h5+ho2=c4h6+o2                         6.00E+11    0.0        0.0
1184. nc4h5+o2=c2h3chcho+o                      3.00E+11    0.3       11.0
1185. nc4h5+o2=acrol+hco                        9.20E+16   -1.4     1010.0
1186. c2h+c2h3=c4h4                             1.00E+14    0.0        0.0
1187. c4h4+M=c2h2+c2h2+M                        5.60E+19    0.0    84500.0
1188. c4h4+M=c4h2+h2+M                          2.40E+19    0.0    84500.0
1189. c4h4+o2=nc4h3+ho2                         1.00E+13    0.0    63200.0
1190. c4h4+o2=ic4h3+ho2                         1.00E+13    0.0    44640.0
1191. c4h4+ho2=nc4h3+h2o2                       2.00E+11    0.0    12600.0
1192. c4h4+ho2=ic4h3+h2o2                       1.00E+11    0.0     9920.0
1193. c4h4+ho2=c3h3+hco+oh                      4.00E+11    0.0     8000.0
1194. c4h4+o=ac3h4+co                           3.00E+13    0.0     1810.0
1195. c4h4+h=nc4h3+h2                           6.65E+05    2.5    12240.0
1196. c4h4+h=ic4h3+h2                           3.33E+05    2.5     9240.0
1197. c4h4+oh=nc4h3+h2o                         3.10E+07    2.0     3430.0
1198. c4h4+oh=ic4h3+h2o                         1.55E+07    2.0      430.0
1199. c4h4+o=c3h3+hco                           6.00E+08    1.4     -860.0
1200. c2h4+c2h=c4h4+h                           1.20E+13    0.0        0.0
1201. c2h2+c2h2=ic4h3+h                         1.13E+14    0.0    56000.0
1202. ic4h3+o2=ch2co+hcco                       1.00E+12    0.0        0.0
1203. ic4h3+oh=c4h2+h2o                         3.00E+13    0.0        0.0
1204. ic4h3+o=h2c4o+h                           2.00E+13    0.0        0.0
1205. ic4h3+h=c4h2+h2                           5.00E+13    0.0        0.0
1206. ic4h3(+M)=c4h2+h(+M)                      1.00E+14    0.0    55000.0
    Low pressure limit:  0.25000E+16  0.00000E+00  0.48000E+05
1207. nc4h3(+M)=c4h2+h(+M)                      1.00E+14    0.0    36000.0
    Low pressure limit:  0.10000E+15  0.00000E+00  0.30000E+05
1208. nc4h3+oh=c4h2+h2o                         3.00E+13    0.0        0.0
1209. nc4h3+h=c4h2+h2                           5.00E+13    0.0        0.0
1210. c2h2+c2h(+M)=nc4h3(+M)                    8.30E+10    0.9     -363.0
    Low pressure limit:  0.12400E+32 -0.47180E+01  0.18710E+04
    TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+03  0.56130E+04  0.13387E+05
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      c2h2            Enhanced by    2.500E+00
      c2h4            Enhanced by    2.500E+00
1211. c2h2+c2h(+M)=ic4h3(+M)                    8.30E+10    0.9     -363.0
    Low pressure limit:  0.12400E+32 -0.47180E+01  0.18710E+04
    TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+03  0.56130E+04  0.13387E+05
      h2              Enhanced by    2.000E+00
      h2o             Enhanced by    6.000E+00
      ch4             Enhanced by    2.000E+00
      co              Enhanced by    1.500E+00
      co2             Enhanced by    2.000E+00
      c2h6            Enhanced by    3.000E+00
      c2h2            Enhanced by    2.500E+00
      c2h4            Enhanced by    2.500E+00
1212. h2c4o+oh=ch2co+hcco                       1.00E+07    2.0     2000.0
1213. h2c4o+h=c2h2+hcco                         5.00E+13    0.0     3000.0
1214. c2h2+c2h=c4h2+h                           9.03E+13    0.0        0.0
1215. c4h2+oh=h2c4o+h                           6.66E+12    0.0     -410.0
1216. c4h2+o=c3h2+co                            1.20E+12    0.0        0.0
1217. sc4h9oh+h<=>sc4h9o+h2                     5.36E+04    2.5     4405.0
1218. sc4h9oh+oh<=>sc4h9o+h2o                   1.50E+10    0.8     2534.0
1219. sc4h9oh+o<=>sc4h9o+oh                     1.46E-03    4.7     1727.0
1220. sc4h9oh+ho2<=>sc4h9o+h2o2                 2.50E+12    0.0    24000.0
1221. sc4h9oh+ch3<=>sc4h9o+ch4                  1.02E+00    3.6     8221.0
1222. sc4h9oh+hco<=>sc4h9o+ch2o                 3.40E+04    2.5    13500.0
1223. sc4h9oh+ch3o<=>sc4h9o+ch3oh               2.30E+10    0.0     2900.0
1224. sc4h9oh+ch3o2<=>sc4h9o+ch3o2h             1.50E+12    0.0    15000.0
1225. sc4h9oh+c2h5<=>sc4h9o+c2h6                1.00E+11    0.0     9200.0
1226. sc4h9oh+pc4h9<=>sc4h9o+c4h10              1.00E+11    0.0     9200.0
1227. sc4h9oh+sc4h9<=>sc4h9o+c4h10              1.00E+11    0.0     9200.0
1228. nc3h7hco=c3h7co+h                         5.00E+15    0.0    85000.0
```

1229. nc3h7hco=c3h6cho-2+h 5.00E+15 0.0 94990.0
1230. nc3h7hco=c3h6cho-3+h 5.00E+15 0.0 94990.0
1231. nc3h7hco=c3h6cho-4+h 8.00E+15 0.0 98000.0
1232. nc3h7hco=>nc3h7+hco 6.00E+14 0.0 79100.0
1233. nc3h7hco=ch2ch2hco+ch3 1.00E+17 0.0 84650.0
1234. nc3h7hco=c2h5+ch2hco 1.58E+17 0.0 80280.0
1235. nc3h7hco+o2=c3h7co+ho2 3.00E+13 0.0 39150.0
1236. nc3h7hco+o2=c3h6cho-2+ho2 4.00E+13 0.0 47690.0
1237. nc3h7hco+o2=c3h6cho-3+ho2 4.00E+13 0.0 47690.0
1238. nc3h7hco+o2=c3h6cho-4+ho2 4.00E+13 0.0 50870.0
1239. nc3h7hco+h=c3h7co+h2 4.10E+09 1.2 2405.0
1240. nc3h7hco+h=c3h6cho-2+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
1241. nc3h7hco+h=c3h6cho-3+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
1242. nc3h7hco+h=c3h6cho-4+h2 9.50E+04 2.8 6280.0
1243. nc3h7hco+o=c3h7co+oh 5.85E+12 0.0 1808.0
1244. nc3h7hco+o=c3h6cho-2+oh 4.77E+04 2.7 2106.0
1245. nc3h7hco+o=c3h6cho-3+oh 4.77E+04 2.7 2106.0
1246. nc3h7hco+o=c3h6cho-4+oh 9.50E+04 2.7 3716.0
1247. nc3h7hco+oh=c3h7co+h2o 2.35E+10 0.7 -1113.0
1248. nc3h7hco+oh=c3h6cho-2+h2o 4.68E+07 1.6 -35.0
1249. nc3h7hco+oh=c3h6cho-3+h2o 4.68E+07 1.6 -35.0
1250. nc3h7hco+oh=c3h6cho-4+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
1251. nc3h7hco+ho2=c3h7co+h2o2 3.10E+12 0.0 11920.0
1252. nc3h7hco+ho2=c3h6cho-2+h2o2 5.60E+12 0.0 17690.0
1253. nc3h7hco+ho2=c3h6cho-3+h2o2 5.60E+12 0.0 17690.0
1254. nc3h7hco+ho2=c3h6cho-4+h2o2 8.50E+12 0.0 20440.0
1255. nc3h7hco+ch3=c3h7co+ch4 1.70E+12 0.0 8440.0
1256. nc3h7hco+ch3=c3h6cho-2+ch4 2.70E+04 2.3 7287.0
1257. nc3h7hco+ch3=c3h6cho-3+ch4 2.70E+04 2.3 7287.0
1258. nc3h7hco+ch3=c3h6cho-4+ch4 4.50E-03 3.6 7154.0
1259. nc3h7hco+hco=c3h7co+ch2o 1.70E+12 0.0 8440.0
1260. nc3h7hco+ch3o=c3h7co+ch3oh 1.15E+11 0.0 1280.0
1261. nc3h7hco+ch3o2=c3h7co+ch3o2h 1.00E+12 0.0 9500.0
1262. nc3h7hco+c2h5=c3h7co+c2h6 1.70E+12 0.0 8440.0
1263. nc3h7hco+c2h3=c3h7co+c2h4 1.70E+12 0.0 8440.0
1264. c3h7co=c2h5chco+h 4.66E+10 0.8 42550.0
1265. c3h7co=ch2co+c2h5 2.74E+09 1.4 35830.0
1266. c3h7co+m=nc3h7+co+m 8.64E+15 0.0 14400.0
1267. c3h6cho-4+o2=c3h6cho-4o2 9.00E+18 -2.5 0.0
1268. c3h6cho-4o2+ho2=but4ooh1*o+o2 2.11E+10 0.0 -3640.0
1269. c3h6cho-4o2+h2o2=but4ooh1*o+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
1270. c3h6cho-4o2+ho2=>c3h6cho-4o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1271. c3h6cho-4o2+ch3o2=>c3h6cho-4o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1272. c3h6cho-4o=ch2o+ch2ch2hco 2.00E+13 0.0 20000.0
1273. c3h6cho-4o+o2=choc2h4cho+ho2 8.43E+09 0.0 220.0
1274. c3h6cho-3+o2=c3h6cho-3o2 9.00E+18 -2.5 0.0
1275. c3h6cho-3o2+ho2=but3ooh1*o+o2 2.11E+10 0.0 -3640.0
1276. c3h6cho-3o2+h2o2=but3ooh1*o+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
1277. c3h6cho-3o2+ho2=>c3h6cho-3o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1278. c3h6cho-3o2+ch3o2=>c3h6cho-3o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1279. c3h6cho-3o=ch3hco+ch2hco 2.00E+13 0.0 20000.0
1280. c3h6cho-3o+o2=c4ald2oxo+ho2 8.43E+09 0.0 220.0
1281. c3h6cho-2+o2=c3h6cho-2o2 9.00E+18 -2.5 0.0
1282. c3h6cho-2o2+ho2=but2ooh1*o+o2 2.11E+10 0.0 -3640.0
1283. c3h6cho-2o2+h2o2=but2ooh1*o+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
1284. c3h6cho-2o2+ho2=>c3h6cho-2o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1285. c3h6cho-2o2+ch3o2=>c3h6cho-2o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0

1286. c3h6cho-2o=chocho+c2h5 2.00E+13 0.0 20000.0
1287. c3h6cho-2o+o2=c4ald3oxo+ho2 8.43E+09 0.0 220.0
1288. choc2h4cho+o2=choc2h4co+ho2 4.00E+13 0.5 42200.0
1289. choc2h4cho+oh=choc2h4co+h2o 5.40E+10 0.8 -340.0
1290. choc2h4cho+h=choc2h4co+h2 8.00E+13 0.0 4200.0
1291. choc2h4cho+o=choc2h4co+oh 1.00E+13 0.0 1790.0
1292. choc2h4cho+ho2=choc2h4co+h2o2 5.60E+12 0.0 13600.0
1293. choc2h4cho+ch3o=choc2h4co+ch3oh 2.30E+11 0.0 1280.0
1294. choc2h4cho+ch3o2=choc2h4co+ch3o2h 2.00E+12 0.0 9500.0
1295. choc2h4co=>ch2ch2hco+co 1.83E+15 -0.7 12910.0
1296. c4h8+oh=ethco+ch3 1.37E+12 0.0 -1040.0
1297. c4h8+oh=nc3h7+ch2o 1.37E+12 0.0 -1040.0
1298. c2c4h8+oh=c2h5+ch3hco 2.74E+12 0.0 -1040.0
1299. t2c4h8+oh=c2h5+ch3hco 2.74E+12 0.0 -1040.0
1300. pc4h8oh-2+o2=pc4h8oh-2oo 1.80E+19 -2.5 0.0
1301. sc4h8oh-1+o2=sc4h8oh-1oo 1.50E+18 -2.5 0.0
1302. sc4h8oh-3+o2=sc4h8oh-3oo 9.50E+18 -2.5 0.0
1303. pc4h8oh-2oo=ethco+ch2o+oh 1.00E+09 0.0 30.0
1304. sc4h8oh-1oo=ethco+ch2o+oh 1.00E+09 0.0 30.0
1305. sc4h8oh-3oo=ch3hco+ch3hco+oh 1.00E+09 0.0 30.0
1306. sc4h8oh-1=ch3hco+c2h5 1.52E+12 0.6 31120.0
1307. sc4h8oh-3=ch3+ethco 1.52E+12 0.6 31120.0
1308. pc4h9+o2=c4h91o2 4.82E+36 -8.2 5170.0
1309. sc4h9+o2=c4h92o2 1.84E+45 -11.1 6540.0
1310. c4h91o2=nc3h7hco+oh 1.84E+05 2.4 36500.0
1311. c4h91o2=c4h81ooh2j 1.92E+07 1.5 28600.0
1312. c4h91o2=c4h81ooh3j 8.52E+06 1.4 20900.0
1313. c4h91o2=c4h81ooh4j 1.46E+06 1.4 20500.0
1314. c4h92o2=butanone+oh 1.25E+06 2.1 35600.0
1315. c4h92o2=c4h82ooh1j 5.52E+07 1.5 32400.0
1316. c4h92o2=c4h82ooh3j 7.08E+08 1.2 28800.0
1317. c4h92o2=c4h82ooh4j 1.49E+08 1.1 24500.0
1318. c4h81ooh2j+o2=but1ooh2o2 1.84E+45 -11.1 6540.0
1319. c4h81ooh3j+o2=but1ooh3o2 1.84E+45 -11.1 6540.0
1320. c4h81ooh4j+o2=but1ooh4o2 4.82E+36 -8.2 5170.0
1321. c4h82ooh1j+o2=but2ooh1o2 4.82E+36 -8.2 5170.0
1322. c4h82ooh3j+o2=but2ooh3o2 1.84E+45 -11.1 6540.0
1323. c4h82ooh4j+o2=but2ooh4o2 4.82E+36 -8.2 5170.0
1324. but1ooh2o2=>but1ooh2*o+oh 4.87E+05 2.2 35100.0
1325. but1ooh2o2=>but2ooh1*o+oh 9.56E+07 1.4 26600.0
1326. but1ooh3o2=>but4ooh2*o+oh 4.87E+05 2.2 35100.0
1327. but1ooh3o2=>but3ooh1*o+oh 9.30E+07 1.1 16200.0
1328. but1ooh4o2=>but4ooh1*o+oh 6.50E+04 2.5 36500.0
Declared duplicate reaction...
1329. but1ooh4o2=>but4ooh1*o+oh 1.03E+06 1.4 14400.0
Declared duplicate reaction...
1330. but2ooh1o2=>but2ooh1*o+oh 6.50E+04 2.5 36500.0
1331. but2ooh1o2=>but1ooh2*o+oh 2.52E+07 1.4 23300.0
1332. but2ooh3o2=>but3ooh2*o+oh 4.87E+05 2.2 35100.0
Declared duplicate reaction...
1333. but2ooh3o2=>but3ooh2*o+oh 2.52E+07 1.4 23300.0
Declared duplicate reaction...
1334. but2ooh4o2=>but3ooh1*o+oh 6.50E+04 2.5 36500.0
1335. but2ooh4o2=>but4ooh2*o+oh 1.45E+08 0.9 13800.0
1336. but2ooh1*o=>ethco+hco+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
1337. but3ooh1*o=>ch3hco+ch2hco+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
1338. but4ooh1*o=>ch2o+ch2ch2hco+oh 6.00E+14 0.0 42330.0

1339. but1ooh2*o=>c2h5co+ch2o+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
1340. but3ooh2*o=>ch3co+ch3hco+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
1341. but4ooh2*o=>ch2o+ch2coch3+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
1342. c4h81ooh2j=>c4h8cy1o2+oh 1.71E+09 1.1 10900.0
1343. c4h81ooh3j=>c4h8cy1o3+oh 2.59E+09 0.7 16000.0
1344. c4h81ooh4j=>c4h8cy1o4+oh 1.72E+08 0.8 11100.0
1345. c4h82ooh1j=>c4h8cy1o2+oh 2.35E+10 0.7 10800.0
1346. c4h82ooh3j=>c4h8cy2o3+oh 4.78E+09 0.8 9600.0
Declared duplicate reaction...
1347. c4h82ooh3j=>c4h8cy2o3+oh 1.01E+10 0.7 10500.0
Declared duplicate reaction...
1348. c4h82ooh4j=>c4h8cy1o3+oh 2.44E+09 0.8 18000.0
1349. c4h8cy1o2+h=>h2+c3h6cho-2 9.60E+08 1.5 2785.0
1350. c4h8cy1o2+h=>h2+c2h5coch2 4.80E+08 1.5 2005.0
1351. c4h8cy1o3+h=>h2+c3h6cho-3 9.60E+08 1.5 2785.0
1352. c4h8cy1o3+h=>h2+ch3coc2h4p 4.80E+08 1.5 2005.0
1353. c4h8cy1o4+h=>h2+c3h6cho-4 1.92E+09 1.5 2005.0
1354. c4h8cy2o3+h=>h2+ch3chcoch3 9.60E+08 1.5 2005.0
1355. c4h8cy1o2+oh=>h2o+c3h6cho-2 4.80E+06 2.0 -1192.0
1356. c4h8cy1o2+oh=>h2o+c2h5coch2 2.40E+06 2.0 -1192.0
1357. c4h8cy1o3+oh=>h2o+c3h6cho-3 4.80E+06 2.0 -1192.0
1358. c4h8cy1o3+oh=>h2o+ch3coc2h4p 2.40E+06 2.0 -1192.0
1359. c4h8cy1o4+oh=>h2o+c3h6cho-4 9.60E+06 2.0 -1192.0
1360. c4h8cy2o3+oh=>h2o+ch3chcoch3 4.80E+06 2.0 -1192.0
1361. c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c3h6cho-2 8.00E+12 0.0 14400.0
1362. c4h8cy1o2+ho2=>h2o2+c2h5coch2 4.00E+12 0.0 13260.0
1363. c4h8cy1o3+ho2=>h2o2+c3h6cho-3 8.00E+12 0.0 14400.0
1364. c4h8cy1o3+ho2=>h2o2+ch3coc2h4p 4.00E+12 0.0 13260.0
1365. c4h8cy1o4+ho2=>h2o2+c3h6cho-4 1.60E+13 0.0 14400.0
1366. c4h8cy2o3+ho2=>h2o2+ch3chcoch3 8.00E+12 0.0 13260.0
1367. c4h8cy1o2=nc3h7hco 1.59E+12 -0.8 46420.0
1368. c4h8cy1o2=butanone 1.59E+12 -0.8 46420.0
1369. c4h8cy2o3=butanone 3.18E+12 -0.8 46420.0
1370. c4h91o2=c4h8+ho2 1.26E+08 1.4 28900.0
1371. c4h92o2=c4h8+ho2 5.13E+09 1.0 30400.0
1372. c4h92o2=c2c4h8+ho2 3.40E+10 0.7 30700.0
1373. c4h92o2=t2c4h8+ho2 1.45E+10 0.8 29900.0
1374. c4h91o2+ho2=c4h91o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
1375. c4h91o2+h2o2=c4h91o2h+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
1376. c4h91o2+ho2=>pc4h9o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1377. c4h91o2+ch3o2=>pc4h9o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1378. c4h91o2+c4h91o2=>pc4h9o+pc4h9o+o2 2.41E+10 0.0 0.0
1379. c4h91o2h=pc4h9o+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
1380. pc4h9o=nc3h7hco+h 1.70E+13 0.0 20510.0
1381. pc4h9o=ch2o+nc3h7 9.12E+13 0.0 14360.0
1382. pc4h9o+o2=nc3h7hco+ho2 3.61E+10 0.0 1090.0
1383. c4h92o2+ho2=c4h92o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
1384. c4h92o2+h2o2=c4h92o2h+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
1385. c4h92o2+ho2=>sc4h9o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1386. c4h92o2+ch3o2=>sc4h9o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1387. c4h92o2+c4h91o2=>sc4h9o+pc4h9o+o2 2.41E+10 0.0 0.0
1388. c4h92o2+c4h92o2=>sc4h9o+sc4h9o+o2 2.41E+10 0.0 0.0
1389. c4h92o2h=sc4h9o+oh 6.00E+14 0.0 42330.0
1390. sc4h9o=butanone+h 1.51E+13 0.0 18070.0
1391. sc4h9o=ch3hco+c2h5 5.25E+13 0.0 11690.0
1392. sc4h9o=ch3+ethco 1.78E+13 0.0 14890.0
1393. sc4h9o+o2=butanone+ho2 8.43E+09 0.0 420.0

1394. c4h8+ho2=c4h81ooh2j 2.47E+04 2.1 12160.0
1395. c4h8+ho2=c4h82ooh1j 7.74E+03 2.3 11080.0
1396. c2c4h8+ho2=c4h82ooh3j 1.55E+04 2.3 11080.0
1397. t2c4h8+ho2=c4h82ooh3j 1.55E+04 2.3 11080.0
1398. c4h81ooh3j=>c3h6+ch2o+oh 1.23E+09 1.3 24900.0
1399. c4h81ooh4j=>c2h4+c2h4o2h 2.33E+12 0.6 29000.0
1400. c4h82ooh4j=>c3h6+ch2o+oh 3.08E+08 1.5 23500.0
1401. c4h82ooh1j=>ch2hco+c2h5+oh 4.87E+12 0.3 29600.0
1402. c4h81ooh2j=>c3h5o+ch3+oh 1.09E+09 1.4 29500.0
1403. c4h82ooh3j=>ch3chcho+ch3+oh 2.78E+11 0.7 32500.0
1404. c4h91o2+pc4h9=pc4h9o+pc4h9o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1405. c4h91o2+sc4h9=pc4h9o+sc4h9o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1406. c4h92o2+pc4h9=sc4h9o+pc4h9o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1407. c4h92o2+sc4h9=sc4h9o+sc4h9o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1408. pc4h9+ho2=pc4h9o+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
1409. sc4h9+ho2=sc4h9o+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
1410. c4h91o2+ch3=pc4h9o+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1411. c4h92o2+ch3=sc4h9o+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1412. pc4h9+ch3o2=pc4h9o+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1413. sc4h9+ch3o2=sc4h9o+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
1414. Cc4h7-1+o2=c4h73o2 6.00E+09 0.0 -2300.0
1415. c4h73o2=c4h6+ho2 5.13E+09 1.0 28400.0
1416. c4h73o2=c4h63ooh4j 8.62E+08 1.0 35500.0
1417. c4h71o2=c4h61ooh4j 1.48E+08 1.0 21000.0
1418. c4h63ooh4j+o2=c4h63ooh4o2 1.50E+18 -2.5 0.0
1419. c4h61ooh4j+o2=c4h61ooh4o2 1.20E+10 0.0 -2300.0
1420. c4h63ooh4o2=>c4h54o2h3*o+oh 2.87E+08 1.0 25500.0
1421. c4h61ooh4o2=>c4h54o2h1*o+oh 9.87E+07 1.0 26500.0
1422. c4h54o2h3*o=>ch2o+c2h3co+oh 1.00E+16 0.0 43000.0
1423. c4h54o2h1*o=>ch2o+c2h2+hco+oh 1.00E+16 0.0 43000.0
1424. c4h73o2=ch3hco+ch2hco 1.70E+09 1.0 26400.0
1425. c4h71o2=ch3chcho+ch2o 1.70E+09 1.0 26400.0
1426. ch3coc2h4p=c2h5coch2 5.02E+09 1.0 19800.0
1427. ch3coc2h4p+o2=acetoch2o2 9.00E+18 -2.5 0.0
1428. acetoch2o2+ho2=but4ooh2*o+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
1429. acetoch2o2+h2o2=but4ooh2*o+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
1430. acetoch2o2+ho2=>acetoch2o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1431. acetoch2o2+ch3o2=>acetoch2o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1432. acetoch2o=ch2o+ch2coch3 2.00E+13 0.0 20000.0
1433. acetoch2o+o2=c4ald3oxo+ho2 8.43E+09 0.0 220.0
1434. c2h5coch2+o2=c2h5coch2o2 9.00E+18 -2.5 0.0
1435. c2h5coch2o2+ho2=but1ooh2*o+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
1436. c2h5coch2o2+h2o2=but1ooh2*o+ho2 2.41E+12 0.0 9936.0
1437. c2h5coch2o2+ho2=>c2h5coch2o+oh+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1438. c2h5coch2o2+ch3o2=>c2h5coch2o+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
1439. c2h5coch2o=ch2o+c2h5co 2.00E+13 0.0 20000.0
1440. c2h5coch2o+o2=c4ald2oxo+ho2 8.43E+09 0.0 220.0
1441. aceton+ch3o=ch2coch3+ch3oh 1.00E+11 0.0 7000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+10 0.0 9000.0
1442. c3h2+o2=hcco+co+h 5.00E+13 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
1443. c3h6o=c2h4+ch2o 6.00E+14 0.0 60000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.97E+11 0.0 50000.0
1444. c3h6o1-3=c2h4+ch2o 6.00E+14 0.0 60000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.97E+11 0.0 31080.0
1445. ac3h4+ho2=c2h4+co+oh 1.00E+12 0.0 14000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+00 0.0 0.0

1446.	ocho+m=h+co2+m	2.44E+15	-0.5	26500.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+13	0.0	29000.0
1447.	tc3h6cho=ic3h5cho+h	2.88E+16	-0.6	41280.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.30E+13	0.0	1200.0
1448.	tc3h6cho=ic3h6co+h	8.88E+16	-0.7	44350.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.30E+13	0.0	4800.0
1449.	tc3h6cho+h2=ic3h7cho+h	2.16E+05	2.4	18990.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.32E+05	2.5	3550.0
1450.	ic3h7cho=tc3h6cho+h	2.30E+18	-0.9	92000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E+14	0.0	0.0
1451.	tc3h6cho+ch2o=ic3h7cho+hco	2.52E+08	1.9	18190.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.23E+07	2.0	17420.0
1452.	ic3h6co+oh=ic3h7+co2	1.73E+12	0.0	-1010.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.58E+14	-0.4	55480.0
1453.	ic3h7cho+ho2=ic3h7co+h2o2	3.00E+12	0.0	11920.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.71E+12	-0.3	11990.0
1454.	ic3h7cho+ho2=tc3h6cho+h2o2	8.00E+10	0.0	11920.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.37E+12	-0.4	11050.0
1455.	ic3h7cho+ch3=ic3h7co+ch4	3.98E+12	0.0	8700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.32E+13	-0.1	25630.0
1456.	ic3h7cho+o=ic3h7co+oh	7.18E+12	0.0	1389.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.05E+11	-0.1	15740.0
1457.	ic3h7cho+o2=ic3h7co+ho2	4.00E+13	0.0	37600.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.62E+11	0.3	-3432.0
1458.	ic3h7cho+oh=ic3h7co+h2o	2.41E+12	0.0	-781.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.33E+12	-0.1	30820.0
1459.	ic3h7cho+oh=tc3h6cho+h2o	1.68E+12	0.0	-781.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.19E+13	-0.1	29810.0
1460.	ic3h7cho+h=ic3h7co+h2	2.60E+12	0.0	2600.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+00	0.0	0.0
1461.	ic3h7cho=ic3h7+hco	1.13E+17	0.0	79760.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.81E+13	0.0	0.0
1462.	ic3h7co=ic3h7+co	1.43E+13	0.0	10950.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	4810.0
1463.	ic3h7cho+oh=ic3h6cho+h2o	3.12E+06	2.0	-298.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.39E+05	2.0	19130.0
1464.	ic3h7cho+ho2=ic3h6cho+h2o2	2.74E+04	2.5	15500.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.33E+04	2.2	3468.0
1465.	tc3h6cho+o2=ic3h5cho+ho2	2.72E-19	0.0	7240.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.39E+11	-0.2	17310.0
1466.	tc3h6cho+o2=aceton+co+oh	3.62E-20	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1467.	tc3h6cho+ho2=ic3h7cho+o2	3.68E+12	0.0	1310.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.24E+14	-0.2	43350.0
1468.	tc3h6cho+ch3=ic3h5cho+ch4	3.01E+12	-0.3	-131.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.21E+15	-0.8	67900.0
1469.	ic3h5cho+oh=ic3h5co+h2o	1.07E+13	0.0	-348.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1470.	ic3h5cho+ho2=ic3h5co+h2o2	1.00E+12	0.0	11920.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.76E+12	-0.3	12000.0
1471.	ic3h5cho+ch3=ic3h5co+ch4	3.98E+12	0.0	8700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.52E+13	0.0	25570.0
1472.	ic3h5cho+o=ic3h5co+oh	7.18E+12	0.0	1389.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.61E+11	0.0	15680.0
1473.	ic3h5cho+o2=ic3h5co+ho2	2.00E+13	0.0	40700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.31E+10	0.3	-394.0
1474.	ic3h5cho+h=ic3h5co+h2	2.60E+12	0.0	2600.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.80E+11	0.0	18990.0
1475.	ic3h5co=tc3h5+co	4.78E+12	0.0	27470.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.51E+11	0.0	4809.0
1476.	ic3h7+oh=c3h6+h2o	2.41E+13	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.98E+12	0.6	83820.0
1477.	c3h5oh+ho2=ch2cch2oh+h2o2	1.76E+09	0.3	22590.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.01E+09	0.0	2583.0
1478.	c3h5oh+oh=ch2cch2oh+h2o	5.06E+12	0.0	5960.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.46E+12	0.1	17410.0
1479.	c3h5oh+h=ch2cch2oh+h2	3.90E+05	2.5	5821.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.59E+04	2.5	2121.0
1480.	c3h5oh+o2=ch2cch2oh+ho2	4.00E+13	0.0	60690.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.83E+10	0.4	-492.0
1481.	c3h5oh+ch3=ch2cch2oh+ch4	2.40E+11	0.0	8030.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.17E+11	0.1	4810.0
1482.	c3h5oh=ch2cch2oh+h	2.84E+19	-1.1	111100.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+14	0.0	0.0
1483.	ch2cch2oh+o2=ch2oh+co+ch2o	4.34E+12	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1484.	ch2cch2oh=c2h2+ch2oh	2.16E+40	-8.3	45110.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.61E+40	-8.6	20330.0
1485.	ch2cch2oh=ac3h4+oh	6.70E+16	-1.1	42580.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	8.50E+12	0.0	2000.0
1486.	butanone+oh=ch3coc2h4p+h2o	7.55E+09	1.0	1586.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.53E+09	1.0	21020.0
1487.	butanone+oh=ch3chcoch3+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.59E+13	-0.2	28620.0
1488.	butanone+oh=c2h5coch2+h2o	5.10E+11	0.0	1192.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.63E+13	-0.7	27670.0
1489.	butanone+ho2=ch3coc2h4p+h2o2	2.38E+04	2.5	16490.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.86E+04	2.2	4459.0
1490.	butanone+ho2=ch3chcoch3+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.23E+13	-0.6	6080.0
1491.	butanone+ho2=c2h5coch2+h2o2	2.38E+04	2.5	14690.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.84E+07	1.5	9702.0
1492.	butanone+o=ch3coc2h4p+oh	2.25E+13	0.0	7700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.62E+11	0.0	9882.0
1493.	butanone+o=ch3chcoch3+oh	3.07E+13	0.0	3400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.85E+13	-0.2	15000.0
1494.	butanone+o=c2h5coch2+oh	5.00E+12	0.0	5962.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.59E+13	-0.7	15190.0
1495.	butanone+h=ch3coc2h4p+h2	9.16E+06	2.0	7700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.28E+05	2.0	11980.0
1496.	butanone+h=ch3chcoch3+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.93E+07	1.8	16890.0
1497.	butanone+h=c2h5coch2+h2	9.30E+12	0.0	6357.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.79E+14	-0.7	17680.0
1498.	butanone+o2=ch3coc2h4p+ho2	2.05E+13	0.0	51310.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.74E+10	0.3	-1895.0
1499.	butanone+o2=ch3chcoch3+ho2	1.55E+13	0.0	41970.0
1500.	butanone+o2=c2h5coch2+ho2	2.05E+13	0.0	49150.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.12E+13	-0.4	2988.0
1501.	butanone+ch3=ch3coc2h4p+ch4	3.19E+01	3.2	7172.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.89E+01	3.2	11930.0
1502.	butanone+ch3=ch3chcoch3+ch4	1.74E+00	3.5	3680.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.97E+02	3.2	17850.0
1503.	butanone+ch3=c2h5coch2+ch4	1.62E+11	0.0	9630.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.27E+14	-0.7	21430.0
1504.	butanone+ch3o=ch3coc2h4p+ch3oh	2.17E+11	0.0	6460.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.89E+09	0.0	9007.0
1505.	butanone+ch3o=ch3chcoch3+ch3oh	1.45E+11	0.0	2771.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.03E+11	-0.2	14730.0
1506.	butanone+ch3o=c2h5coch2+ch3oh	2.17E+11	0.0	4660.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.14E+12	-0.7	14250.0
1507.	butanone+ch3o2=ch3coc2h4p+ch3o2h	3.01E+12	0.0	19380.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.52E+12	-0.5	4329.0
1508.	butanone+ch3o2=ch3chcoch3+ch3o2h	2.00E+12	0.0	15250.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.64E+14	-0.7	9612.0
1509.	butanone+ch3o2=c2h5coch2+ch3o2h	3.01E+12	0.0	17580.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.84E+15	-1.2	9572.0
1510.	butanone+c2h3=ch3coc2h4p+c2h4	5.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.44E+08	0.8	14030.0
1511.	butanone+c2h3=ch3chcoch3+c2h4	3.00E+11	0.0	3400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.91E+10	0.6	16440.0
1512.	butanone+c2h3=c2h5coch2+c2h4	6.15E+10	0.0	4278.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.72E+10	0.1	14950.0
1513.	butanone+c2h5=ch3coc2h4p+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.55E+12	-0.6	13990.0
1514.	butanone+c2h5=ch3chcoch3+c2h6	3.00E+10	0.0	8600.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.32E+14	-0.8	18600.0
1515.	butanone+c2h5=c2h5coch2+c2h6	5.00E+10	0.0	11600.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.14E+15	-1.3	19230.0
1516.	c43oo2*o=ch3chcoch3+o2	1.94E+20	-2.2	26170.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	0.0
1517.	c43oo2*o=c4j3ooh2*o	8.90E+12	0.0	29700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.70E+13	-0.5	16960.0
1518.	c4j3ooh2*o=mvk+ho2	2.03E+19	-2.4	14130.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+10	0.0	7800.0
1519.	mvk+oh=ch3hco+ch3co	1.37E+12	0.0	-1040.0
1520.	ic3h6co+h=ic3h7+co	4.40E+12	0.0	1459.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1521.	ic3h6co+o=aceton+co	3.20E+12	0.0	-437.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1522.	ch3chco+oh=c2h5+co2	1.73E+12	0.0	-1010.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1523.	ch3chco+oh=ch3choh+co	2.00E+12	0.0	-1010.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1524.	ch3chco+h=c2h5+co	4.40E+12	0.0	1459.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1525.	ch3chco+o=ch3hco+co	3.20E+12	0.0	-437.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1526.	ch3coc2h4p=c2h4+ch3co	5.97E+12	0.0	20730.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.11E+11	0.0	7350.0
1527.	c2h5coch2=ch2co+c2h5	1.57E+13	0.0	30000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.11E+11	0.0	7350.0
1528.	c2h5chco+oh=nc3h7+co2	3.73E+12	0.0	-1010.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1529.	c2h5chco+h=nc3h7+co	4.40E+12	0.0	1459.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1530.	c2h5chco+o=c3h6+co2	3.20E+12	0.0	-437.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1531.	ch3chcho+ho2=ch3chocho+oh	9.64E+12	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.31E+19	-1.5	28580.0
1532.	ch3chocho=ch3hco+hco	3.98E+13	0.0	9700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.34E+05	1.7	8282.0
1533.	ch3chcho=ch3chco+h	1.34E+13	-0.2	33460.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+12	0.0	1200.0
1534.	ch3chcho+o2=ch3chco+ho2	1.81E+11	0.0	1840.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.31E+13	-0.5	19540.0
1535.	ch3chcho+o2=acrol+ho2	2.72E+11	0.0	7240.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.46E+14	-0.7	25880.0
1536.	ch3chcho+o2=ch3hco+co+oh	3.62E+10	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1537.	sc3h5cho+o=sc3h5co+oh	7.18E+12	0.0	1389.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.31E+12	0.0	21570.0
1538.	sc3h5cho+o2=sc3h5co+ho2	4.00E+13	0.0	37600.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.01E+11	0.3	2394.0
1539.	sc3h5co=sc3h5+co	8.60E+15	0.0	23000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	6000.0
1540.	sc3h5cho=c3h6+co	3.90E+14	0.0	69000.0
1541.	sc3h5cho+h=c2h3chcho+h2	1.70E+05	2.5	2490.0
1542.	sc3h5cho+h=sc3h5co+h2	1.00E+05	2.5	2490.0
1543.	sc3h5cho+h=ch3+acrol	4.00E+21	-2.4	11180.0
1544.	sc3h5cho+h=c3h6+hco	4.00E+21	-2.4	11180.0
1545.	sc3h5cho+ch3=c2h3chcho+ch4	2.10E+00	3.5	5675.0
1546.	sc3h5cho+ch3=sc3h5co+ch4	1.10E+00	3.5	5675.0
1547.	sc3h5cho+c2h3=c2h3chcho+c2h4	2.21E+00	3.5	4682.0
1548.	sc3h5cho+c2h3=sc3h5co+c2h4	1.11E+00	3.5	4682.0
1549.	ch3chcoch3=mvk+h	3.42E+16	-0.8	41770.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+12	0.0	1200.0
1550.	ch3chcoch3=ch3chco+ch3	1.41E+15	-0.4	38340.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.23E+11	0.0	7800.0
1551.	c3h6cho-2=c2h5chco+h	8.43E+15	-0.6	40400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+12	0.0	1200.0
1552.	c3h6cho-2=acrol+ch3	3.17E+14	-0.4	29900.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.23E+11	0.0	7800.0
1553.	c3h6cho-3=sc3h5cho+h	4.95E+12	-0.1	31300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+12	0.0	2900.0
1554.	c3h6cho-3=c3h6+hco	8.25E+12	-0.2	21900.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	6000.0
1555.	c3h6cho-4=c2h4+ch2hco	7.40E+11	0.0	21970.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.11E+11	0.0	7350.0
1556.	ac3h5hco=ac3h5+hco	1.81E+19	-1.1	68480.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
1557.	ac3h5hco+oh=ac3h5co+h2o	3.37E+12	0.0	616.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.18E+12	0.0	32150.0
1558.	ac3h5hco+oh=c2h3chcho+h2o	3.12E+06	2.0	-298.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.25E+08	1.8	34930.0
1559.	ac3h5hco+ho2=ac3h5co+h2o2	3.00E+12	0.0	11920.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.15E+13	-0.3	11990.0
1560.	ac3h5hco+ho2=c2h3chcho+h2o2	9.63E+03	2.6	13910.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.28E+06	2.1	17670.0
1561.	ac3h5hco+ch3o2=ac3h5co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	11920.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.58E+13	-0.5	11270.0
1562.	ac3h5hco+ch3o2=c2h3chcho+ch3o2h	1.99E+12	0.0	17050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.94E+15	-0.7	20090.0
1563.	ac3h5co=ac3h5+co	6.20E+15	-1.1	-330.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	4810.0
1564.	c2h3chcho+ho2=acrol+hco+oh	8.91E+12	0.0	0.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
1565.	c2h3chcho=ac3h5+co	1.00E+14	0.0	25000.0

```
1566. c2h3chcho+h=ac3h5hco                  1.00E+14    0.0       0.0
1567. butyne+oh=ch3chcch+h2o                1.00E+07    2.0    2000.0
1568. c4h612+oh=ch3ccch2+h2o                1.00E+07    2.0    2000.0
1569. c4h612+oh=ch3chcch+h2o                2.00E+07    2.0    2500.0
1570. c4h612+h=ch3ccch2+h2                  1.50E+07    2.0    6000.0
1571. c4h612+h=ch3chcch+h2                  3.00E+07    2.0    6500.0
1572. ch3chcch+h=ch3+c3h3                   1.00E+14    0.0       0.0
1573. ch3chcch+oh=c4h4+h2o                  3.00E+13    0.0       0.0
1574. ic4h5+h=ch3ccch2+h                    3.00E+13    0.0       0.0
1575. ch3ccch2+h=ch3+c3h3                   1.00E+14    0.0       0.0
1576. ch3ccch2+o2=ch3co+ch2co               4.16E+10    0.0    2510.0
1577. ch3ccch2+h=h2ccch2+h2                 1.00E+14    0.0    8000.0
1578. ch3ccch2+oh=h2ccch2+h2o               1.00E+13    0.0       0.0
1579. ch3chcch(+M)=c4h4+h(+M)               1.00E+13    0.0   49000.0
    Low pressure limit:  0.20000E+15  0.00000E+00  0.41000E+05
1580. ch3ccch2(+M)=h2ccch2+h(+M)            1.00E+13    0.0   56000.0
    Low pressure limit:  0.20000E+15  0.00000E+00  0.48000E+05
1581. h2ccch2+oh=ic4h3+h2o                  2.00E+07    2.0    2000.0
1582. h2ccch2+h=ic4h3+h2                    3.00E+07    2.0    6000.0
1583. ic4h10=ic3h7+ch3                      1.10E+26   -2.6   90420.0
1584. ic4h9+h=ic4h10                        1.00E+14    0.0       0.0
1585. tc4h9+h=ic4h10                        1.00E+14    0.0       0.0
1586. ic4h10+o2=ic4h9+ho2                   4.04E+13    0.0   50870.0
1587. ic4h10+o2=tc4h9+ho2                   3.97E+13    0.0   43420.0
1588. ic4h10+o=ic4h9+oh                     1.53E+14    0.0    7850.0
1589. ic4h10+o=tc4h9+oh                     1.00E+13    0.0    3280.0
1590. ic4h10+h=ic4h9+h2                     8.55E+07    2.0    7700.0
1591. ic4h10+h=tc4h9+h2                     4.20E+06    2.0    2400.0
1592. ic4h10+oh=ic4h9+h2o                   8.01E+06    2.0     450.0
1593. ic4h10+oh=tc4h9+h2o                   1.10E+06    2.0   -1870.0
1594. ic4h10+ho2=ic4h9+h2o2                 1.80E+12    0.0   17000.0
1595. ic4h10+ho2=tc4h9+h2o2                 1.00E+12    0.0   14000.0
1596. ic4h10+ch3=ic4h9+ch4                  9.00E-01    4.0    8200.0
1597. ic4h10+ch3=tc4h9+ch4                  1.00E+11    0.0    7900.0
1598. ic4h10+ch3o2=ic4h9+ch3o2h             1.80E+13    0.0   20000.0
1599. ic4h10+ch3o2=tc4h9+ch3o2h             1.50E+12    0.0   15000.0
1600. ic4h9+h=ic4h8+h2                      9.04E+11    0.0       0.0
1601. ic4h9=tc4h9                           3.56E+10    0.9   34600.0
1602. ic4h9=c3h6+ch3                        9.59E+11    0.8   30710.0
1603. ic4h9+ho2=ic3h7cho+h+oh               1.80E+13    0.0       0.0
1604. tc4h9+ho2=>aceton+ch3+oh              1.80E+13    0.0       0.0
1605. tc4h9+oh=ic4h8+h2o                    1.80E+13    0.0       0.0
1606. tc4h9+h=ic4h8+h2                      5.40E+12    0.0       0.0
1607. tc4h9+o=ic4h8+oh                      4.16E+14    0.0       0.0
1608. tc4h9+o=aceton+ch3                    1.04E+14    0.0       0.0
1609. tc4h9+ch3=ic4h8+ch4                   1.26E+13    0.0    -596.0
1610. ic4h9o2+c3h6=ic4h9o2h+ac3h5           3.24E+11    0.0   14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      2.00E+10    0.0   15000.0
1611. ic4h9o2+ic4h8=ic4h9o2h+ic4h7          1.40E+12    0.0   14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.16E+11    0.0   13000.0
1612. ic4h9o2+c4h8=ic4h9o2h+Cc4h7-1         1.40E+12    0.0   14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.16E+11    0.0   13000.0
1613. ic4h9o=ch2o+ic3h7                     2.00E+14    0.0   17500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      2.16E+11    0.1   11510.0
1614. ic4h9o+o2=ic3h7cho+ho2                1.93E+11    0.0    1660.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.88E+09    0.4   32620.0
1615. ic4h9o2h=ic4h9o+oh                    1.50E+16    0.0   42500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.66E+08    1.7   -3245.0
1616. ic4h9o2+ho2=ic4h9o2h+o2               1.75E+10    0.0   -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      5.11E+13   -0.8   34480.0
1617. ic4h9o2+h2o2=ic4h9o2h+ho2             2.40E+12    0.0   10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      2.40E+12    0.0   10000.0
1618. ic4h9o2+ch2o=ic4h9o2h+hco             1.30E+11    0.0    9000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      2.50E+10    0.0   10100.0
1619. ic4h9o2+ch3o2=>ic4h9o+ch3o+o2         1.40E+16   -1.6    1860.0
1620. ic4h9o2+ic4h9o2=>o2+ic4h9o+ic4h9o     1.40E+16   -1.6    1860.0
1621. ic4h9o2+ho2=>ic4h9o+oh+o2             1.40E-14   -1.6    1860.0
1622. ic4h9o2+ch3=ic4h9o+ch3o               7.00E+12    0.0   -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.77E+12    0.2   26240.0
1623. ic4h9o2+c2h5=ic4h9o+c2h5o             7.00E+12    0.0   -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.90E+12    0.2   29180.0
1624. ic4h9o2+ic4h9=ic4h9o+ic4h9o           7.00E+12    0.0   -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      7.33E+13   -0.2   29370.0
1625. ic4h9o2+ac3h5=ic4h9o+c3h5o            7.00E+12    0.0   -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.18E+11    0.4   14950.0
1626. ic4h9o2+ic4h7=ic4h9o+ic4h7o           7.00E+12    0.0   -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.27E+11    0.4   14740.0
1627. ic4h9+ho2=ic4h9o+oh                   7.00E+12    0.0   -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.26E+16   -0.7   26680.0
1628. ch3o2+ic4h9=ch3o+ic4h9o               7.00E+12    0.0   -1000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.23E+18   -1.3   31440.0
1629. ic4h9o=ic3h7cho+h                     4.00E+14    0.0   21500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.14E+10    1.1    2500.0
1630. ic4h9o+ho2=ic3h7cho+h2o2              1.00E+12    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.38E+13   -0.2   72130.0
1631. ic4h9o+oh=ic3h7cho+h2o                1.81E+13    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      4.21E+13    0.1  103600.0
1632. ic4h9o+ch3=ic3h7cho+ch4               2.40E+13    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.37E+14    0.1   88920.0
1633. ic4h9o+o=ic3h7cho+oh                  6.00E+12    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.42E+12    0.1   86350.0
1634. ic4h9o+h=ic3h7cho+h2                  1.99E+13    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.07E+13    0.1   88440.0
1635. ic4h8+h=ic4h9                         6.25E+11    0.5    2620.0
1636. ic4h8+h=tc4h9                         1.06E+12    0.5    1230.0
1637. ic4h8+o=oh+ic4h7                      4.50E+13    0.0    4500.0
1638. ic4h8+h=h2+ic4h7                      1.72E+14    0.0    7990.0
1639. ic4h8+oh=h2o+ic4h7                    6.00E+06    2.0    -298.0
1640. ic4h8+ho2=h2o2+ic4h7                  1.92E+04    2.6   13900.0
1641. ic4h8+hco=ch2o+ic4h7                  3.30E+11    0.0    6210.0
1642. ic4h8+ch3=ch4+ic4h7                   3.20E+12    0.0   10000.0
1643. ic4h8+ch3o2=ch3o2h+ic4h7              3.96E+12    0.0   17050.0
1644. ic4h8+ic4h9=ic4h7+ic4h10              4.44E+00    3.5    6640.0
1645. ic4h8+o=oh+ic4h7v                     3.00E+12    0.0    4500.0
1646. ic4h8+h=h2+ic4h7v                     1.20E+14    0.0   13000.0
1647. ic4h8+oh=h2o+ic4h7v                   4.50E+12    0.0    3060.0
1648. ic4h8+ch3=ch4+ic4h7v                  2.00E+12    0.0   15000.0
1649. ic4h8+o2=ho2+ic4h7                    2.40E+13    0.0   37800.0
1650. ic4h8+o2=ho2+ic4h7v                   2.00E+13    0.0   43500.0
1651. ic4h8=tc3h5+ch3                       1.50E+16    0.0   93000.0
1652. ic4h7=Cc4h7-1                         6.00E+13    0.0   70000.0
1653. ic4h8=ic4h7+h                         1.50E+15    0.0   83000.0
1654. ic4h8+tc3h5=ic4h7+c3h6                7.94E+11    0.0   20500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      5.59E+20   -1.3   80170.0
1655. ic4h8+sc3h5=ic4h7+c3h6                7.94E+11    0.0   20500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      5.59E+20   -1.3   82170.0
1656. ic4h8+ac3h5=ic4h7+c3h6                7.94E+11    0.0   20500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      4.40E+20   -1.3   60610.0
1657. tc4h9+o2=ic4h8+ho2                    2.07E+12    0.0    5000.0
1658. ic4h9+o2=ic4h8+ho2                    4.50E+11    0.0    5000.0
1659. ic4h8+oh=ch2o+ic3h7                   1.37E+12    0.0   -1040.0
1660. ic4h8+oh=aceton+ch3                   1.37E+12    0.0   -1040.0
1661. ic4h7v=ic4h7                          5.00E+12    0.0   36000.0
1662. ic4h7v+h=ic4h8                        1.00E+14    0.0       0.0
1663. ic4h7v+o2=aceton+hco                  4.60E+16   -1.4    1010.0
1664. ic4h7v=pc3h4+ch3                      1.30E+14    0.0   37000.0
1665. ic4h7v+ch3=bme2bu                     1.00E+15   -0.8       0.0
1666. ic4h8o+oh=>ic3h6cho+h2o               1.25E+12    0.0       0.0
1667. ic4h8o+h=>ic3h6cho+h2                 1.25E+12    0.0       0.0
1668. ic4h8o+ho2=>ic3h6cho+h2o2             2.50E+12    0.0   15000.0
1669. ic4h8o+ch3o2=>ic3h6cho+ch3o2h         2.50E+12    0.0   19000.0
1670. ic4h8o+ch3=>ic3h6cho+ch4              5.00E+10    0.0   10000.0
1671. ic4h8o+o=>ic3h6cho+oh                 1.25E+12    0.0       0.0
1672. ic4h7=ac3h4+ch3                       1.00E+13    0.0   51000.0
1673. ic4h7+o=ic3h5cho+h                    6.03E+13    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      5.01E+15   -0.3   66490.0
1674. ic4h8+ho2=ic4h8o+oh                   1.29E+12    0.0   13340.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.00E+12    0.0    7500.0
1675. ic4h8oh=ic4h8+oh                      9.65E+13   -0.4   28500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      9.93E+11    0.0    -960.0
1676. ic4h9+o2=ic4h9o2                      1.50E+18   -2.5       0.0
1677. ic4h9o2=tc4h8io2h                     1.67E+09    1.0   29500.0
1678. ic4h9o2=ic4h8io2h                     1.53E+08    1.0   28000.0
1679. tc4h8io2h+o2=o2tc4h8io2h              2.50E+19   -2.5       0.0
1680. ic4h8io2h+o2=o2ic4h8io2h              1.50E+18   -2.5       0.0
1681. o2tc4h8io2h=ho2tc4h7io+oh             3.34E+09    1.0   30500.0
1682. o2ic4h8io2h=ho2ic4h7io+oh             5.75E+08    1.0   20000.0
1683. ho2tc4h7io=>hco+aceton+oh             1.00E+16    0.0   42000.0
1684. ho2ic4h7io=>ch2o+ch3chcho+oh          1.00E+16    0.0   42000.0
1685. ic4h8to2h=ic4h8+ho2                   7.16E+19   -2.1   20660.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.97E+11    0.0   12620.0
1686. tc4h8io2h=ic4h8+ho2                   1.02E+16   -1.1   18820.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.97E+11    0.0   12620.0
1687. tc4h8io2h=>ic4h8o+oh                  4.00E+11    0.0   22000.0
1688. ic4h8io2h=>oh+ch2o+c3h6               8.45E+15   -0.7   29170.0
1689. ic4h7oh=ic4h7o+h                      5.97E+16   -0.6  105900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      4.00E+13    0.0       0.0
1690. ic4h8oh=ic4h7oh+h                     3.71E+14   -0.4   40790.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.00E+13    0.0    1200.0
1691. ic4h7o+h2=ic4h7oh+h                   9.05E+06    2.0   17830.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      7.16E+05    2.4   16310.0
1692. ic4h7oh=ic4h7+oh                      7.31E+16   -0.4   79700.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.00E+13    0.0       0.0
1693. ic4h8+o=>ic3h6co+h+h                  1.66E+07    1.8      76.0
1694. ic4h8o=ic3h7cho                       4.18E+13    0.0   52720.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.39E+10    0.6   72050.0
1695. ic4h7o=ic3h5cho+h                     5.00E+13    0.0   29100.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.07E+11    0.5   16470.0
1696. ic3h6cho=c3h6+hco                     1.03E+15   -0.6   23170.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.00E+11    0.0    7800.0
1697. ic3h6cho=acrol+ch3                    2.42E+13   -0.3   22470.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.00E+11    0.0    7800.0
1698. ic4h7+o2=ic3h5cho+oh                  2.47E+13   -0.5   23020.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.62E+14   -0.8   73390.0
1699. ic4h7o+o2=ic3h5cho+ho2                3.00E+10    0.0    1649.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      6.31E+10   -0.1   38980.0
1700. ic4h7o+ho2=ic3h5cho+h2o2              3.00E+11    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      8.93E+14   -0.8   78500.0
1701. ic4h7o+ch3=ic3h5cho+ch4               2.40E+13    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      7.26E+16   -0.5   95290.0
1702. ic4h7o+o=ic3h5cho+oh                  6.00E+12    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.05E+14   -0.5   92720.0
1703. ic4h7o+oh=ic3h5cho+h2o                1.81E+13    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      9.08E+15   -0.5  110000.0
1704. ic4h7o+h=ic3h5cho+h2                  1.99E+13    0.0       0.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      2.30E+15   -0.5   94810.0
1705. ic4h7o=ic4h6oh                        1.39E+11    0.0   15600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      4.23E+11   -0.2   31670.0
1706. ic4h6oh+h2=ic4h7oh+h                  2.16E+04    2.4   18990.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      5.61E+02    3.0    1399.0
1707. ic4h6oh+ho2=ic4h7oh+o2                4.19E+13   -0.3       9.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      6.00E+13    0.0   39900.0
1708. ic4h6oh+ch2o=ic4h7oh+hco              6.30E+08    1.9   18190.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.31E+06    2.5   15270.0
1709. ic4h6oh+ic4h8=ic4h7oh+ic4h7           4.70E+02    3.3   19840.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      2.81E-01    3.9    6521.0
1710. ic4h6oh+h2o=ic4h7oh+oh                5.20E+08    1.4   32450.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      3.12E+06    2.0    -298.0
1711. ic4h6oh+ch4=ic4h7oh+ch3               2.22E+03    2.9   23750.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      2.21E+00    3.5    5675.0
1712. ic4h6oh+c3h6=ic4h7oh+ac3h5            4.82E+04    2.5   19230.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      5.75E+02    3.1   18670.0
1713. ic4h6oh+ch3hco=ic4h7oh+ch3co          1.30E+09    1.4   17440.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      5.30E+06    2.0   16240.0
1714. ic4h7oh=ic4h6oh+h                     4.90E+16   -0.4   89850.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.00E+14    0.0       0.0
1715. ic4h7oh+ho2=ic4h6oh+h2o2              7.92E+02    3.0   12300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      7.83E+05    2.0   13580.0
1716. ic4h6oh=ac3h4+ch2oh                   1.72E+22   -2.7   54980.0
       Reverse Arrhenius coefficients:      1.00E+11    0.0    9200.0
1717. ic4h6oh+ho2=>c3h4oh+ch2o+oh           1.45E+13    0.0       0.0
1718. ic4h9+ho2=>ic3h7+ch2o+oh              2.41E+13    0.0       0.0
1719. ic4h8o=ic3h7+hco                      6.00E+13    0.0   57200.0
1720. ic4h8+o=ic4h8o                        1.00E+08    1.3   -1079.0
1721. ic4h8+c2h3=ic4h7+c2h4                 1.00E+13    0.0   13000.0
1722. ic4h7+ho2=ic4h7o+oh                   4.50E+12    0.0       0.0
1723. ic4h7+ch3=bme1bu                      7.00E+12    0.0       0.0
1724. ic4h7+ic4h7=ac3h4+bme1bu              5.00E+10    0.0    6300.0
1725. tc4h9+ch3o2=aceton+ch3o+ch3           1.30E+13    0.0       0.0
1726. ic4h8+ch3o2=ic4h8o+ch3o               4.00E+11    0.0   12000.0
1727. ic4h7+ch3o2=ic4h7o+ch3o               4.00E+12    0.0   -1200.0
1728. ic4h7o=tc3h5+ch2o                     1.50E+15    0.0   25000.0
1729. c2h5+nc3h7=nc5h12                     5.20E+12    0.0       0.0
1730. nc5h12+h=h2+ch3+2c2h4                 2.70E+07    2.0    5000.0
1731. nc5h12+oh=h2o+ch3+2c2h4               7.80E+06    2.0    -765.0
1732. nc5h12+ho2=h2o2+ch3+2c2h4             1.20E+12    0.0   15500.0
1733. nc5h12+ch3=ch4+ch3+2c2h4              6.00E+11    0.0    9600.0
1734. nc5h12+ch3o2=ch3o2h+ch3+2c2h4         4.50E+12    0.0   17500.0
```

1735. nc5h12+c2h5=c2h6+ch3+2c2h4 6.00E+11 0.0 11000.0
1736. nc5h12+o=oh+ch3+2c2h4 3.40E+07 1.8 550.0
1737. Ac5h11=nc3h7+c2h4 4.50E+13 0.0 28700.0
1738. Bc5h11=c2h5+c3h6 4.50E+13 0.0 29700.0
1739. Cc5h11=ch3+c4h8 4.20E+13 0.0 31000.0
1740. Ac5h11=h+c5h10 3.41E+15 -0.7 36589.0
1741. Bc5h11=h+c5h10 6.76E+12 0.1 37652.0
1742. Bc5h11=h+c2c5h10 2.22E+15 -0.7 37356.0
1743. Bc5h11=h+t2c5h10 1.14E+15 -0.7 36161.0
1744. Cc5h11=h+c2c5h10 4.44E+15 -0.7 37310.0
1745. Cc5h11=h+t2c5h10 2.28E+15 -0.7 36114.0
1746. Ac5h11+o2=c5h10+ho2 1.50E-19 0.0 5000.0
1747. Bc5h11+o2=c2c5h10+ho2 1.00E+11 0.0 5020.0
1748. Bc5h11+o2=t2c5h10+ho2 2.00E+11 0.0 5020.0
1749. Bc5h11+o2=c5h10+ho2 2.00E+11 0.0 5020.0
1750. Cc5h11+o2=c2c5h10+ho2 3.58E+09 0.0 -3532.0
1751. Cc5h11+o2=t2c5h10+ho2 3.58E+09 0.0 -3532.0
1752. Ac5h11=Bc5h11 1.00E+12 0.0 22515.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.00E+11 0.0 23906.0
1753. Ac5h11=Cc5h11 3.00E+11 0.0 24045.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 25436.0
1754. Ac5h11+ho2=>ch2o+pc4h9+oh 1.00E+13 0.0 0.0
1755. Ac5h11+o=ch2o+pc4h9 1.61E+13 0.0 0.0
1756. Ac5h11+o2=ch2o+oh+c4h8 2.10E+11 0.0 6158.0
1757. Bc5h11+ho2=>ch3hco+oh+nc3h7 1.00E+13 0.0 0.0
1758. Bc5h11+o=ch3hco+nc3h7 1.61E+13 0.0 0.0
1759. Bc5h11+o2=>oh+ch3hco+c3h6 2.10E+11 0.0 6158.0
1760. Cc5h11+ho2=>oh+ethco+c2h5 1.00E+13 0.0 0.0
1761. Cc5h11+o=ethco+c2h5 1.61E+13 0.0 0.0
1762. Cc5h11+o2=>oh+ethco+c2h4 2.10E+11 0.0 6158.0
1763. c5h10=c2h5+ac3h5 9.17E+20 -1.6 73990.0
1764. c5h10+ch3=nc3h7+c3h6 9.60E+10 0.0 8000.0
1765. c2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8 1.70E+11 0.0 7400.0
1766. t2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8 1.70E+11 0.0 7400.0
1767. c5h10+oh=pc4h9+ch2o 1.00E+11 0.0 0.0
1768. c5h10+oh=nc3h7+ch3hco 1.00E+11 0.0 0.0
1769. c2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco 1.00E+12 0.0 0.0
1770. t2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco 1.00E+12 0.0 0.0
1771. c2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9 1.00E+12 0.0 0.0
1772. t2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9 1.00E+12 0.0 0.0
1773. c5h10+o=pc4h9+hco 1.00E+11 0.0 0.0
1774. c5h10+o=nc3h7+ch3co 1.00E+11 0.0 0.0
1775. c2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4 3.40E+07 1.8 550.0
1776. t2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4 3.40E+07 1.8 550.0
1777. c5h10+h=h2+Cc5h9-1 1.95E+13 0.0 4445.0
1778. c5h10+oh=h2o+Cc5h9-1 3.00E+06 2.0 -1520.0
1779. c5h10+ho2=Cc5h9-1+h2o2 6.40E+03 2.6 12400.0
1780. c5h10+ch3=ch4+Cc5h9-1 2.00E+11 0.0 6800.0
1781. c5h10+ch3o2=ch3o2h+Cc5h9-1 1.00E+12 0.0 14550.0
1782. c5h10+c2h5=c2h6+Cc5h9-1 4.40E+00 3.5 4140.0
1783. c5h10+o=oh+Cc5h9-1 8.80E+10 0.7 3250.0
1784. c5h10+h=Dc5h9-1+h2 9.10E+06 0.0 5000.0
1785. c5h10+oh=Dc5h9-1+h2o 2.60E+06 2.0 -770.0
1786. c5h10+ho2=Dc5h9-1+h2o2 4.00E+11 0.0 15000.0
1787. c5h10+ch3=Dc5h9-1+ch4 6.60E+11 0.0 10120.0
1788. c5h10+h=Ec5h9-1+h2 2.80E+07 2.0 7700.0
1789. c5h10+oh=Ec5h9-1+h2o 2.67E+06 2.0 450.0
1790. c5h10+ho2=Ec5h9-1+h2o2 5.60E+12 0.0 19400.0
1791. c5h10+ch3=Ec5h9-1+ch4 1.47E+12 0.0 11722.0
1792. sc3h5+c2h5=c2c5h10 1.00E+13 0.0 0.0
1793. sc3h5+c2h5=t2c5h10 1.00E+13 0.0 0.0
1794. Cc5h9-1=c4h6+ch3 6.50E+12 0.0 38200.0
1795. Dc5h9-1=c5h8-13+h 3.20E+13 0.0 34800.0
1796. Bc5h9-1=ac3h5+c2h4 3.30E+13 0.0 22500.0
1797. Cc5h9-1+h=c5h10 1.00E+13 0.0 0.0
1798. Cc5h9-1+h=c2c5h10 1.00E+13 0.0 0.0
1799. Cc5h9-1+h=t2c5h10 1.00E+13 0.0 0.0
1800. Cc5h9-1=c5h8-13+h 1.50E+13 0.0 50500.0
1801. Cc5h9-1+o2=c5h8-13+ho2 5.90E+05 0.0 0.0
1802. Cc5h9-1+ho2=>acrol+c2h5+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
1803. Cc5h9-1+ho2=>ethco+c2h3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
1804. Cc5h9-1+h=c5h8-13+h2 3.16E+13 0.0 0.0
1805. Cc5h9-1+ch3=c5h8-13+ch4 1.00E+13 0.0 0.0
1806. Cc5h9-1+c2h3=c5h8-13+c2h4 4.00E+12 0.0 0.0
1807. Cc5h9-1+c2h5=c5h8-13+c2h6 4.00E+12 0.0 0.0
1808. Cc5h9-1+ac3h5=c5h8-13+c3h6 1.33E+12 0.0 0.0
1809. nc4h5+ch3=c5h8-13 2.00E+13 0.0 0.0
1810. sc3h5+c2h3=c5h8-13 1.00E+13 0.0 0.0
1811. ac3h5+c2h3=c5h8-13 1.00E+13 0.0 0.0
1812. ic4h5+ch3=c5h8-13 4.80E+37 -7.6 11359.0
1813. c5h8-13+o2=acrol+ch3hco 2.00E+08 1.5 30200.0
1814. c5h8-13+ho2=>acrol+c2h4+oh 5.00E+11 0.0 19000.0
1815. c5h8-13+ho2=>c4h6+ch2o+oh 5.00E+11 0.0 19000.0
1816. c5h8-13+oh=ch3hco+ac3h5 1.37E+12 0.0 -1040.0
1817. c5h8-13+oh=c2h5+acrol 1.37E+12 0.0 -1040.0
1818. c5h8-13+oh=ch3hco+sc3h5 1.37E+12 0.0 -1040.0
1819. c5h8-13+oh=ch2o+Cc4h7-1 1.37E+12 0.0 -1040.0
1820. c5h8-13+o=acrol+c2h4 4.50E+08 1.4 -858.0
1821. c5h8-13+o=ch2o+c4h6 4.50E+08 1.4 -858.0
1822. c5h8-13+h=c5h7+h2 7.00E+06 2.0 0.0
1823. c5h8-13+h=ac3h5+c2h4 3.35E+08 1.5 2000.0
1824. c5h8-13+oh=c5h7+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
1825. c5h8-13+ho2=c5h7+h2o2 2.00E+11 0.0 12600.0
1826. c5h8-13+ch3=c5h7+ch4 2.00E+14 0.0 22800.0
1827. c5h8-14+oh=c5h7+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
1828. c5h8-14+oh=ch3hco+ac3h5 1.37E+12 0.0 -1040.0
1829. c5h8-14+oh=ch2o+Dc4h7-1 1.37E+12 0.0 -1040.0
1830. c5h8-14+h=c5h7+h2 5.50E+04 2.5 -1900.0
1831. c5h8-14+o=c5h7+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
1832. c5h8-14+ho2=c5h7+h2o2 7.50E+03 2.6 12400.0
1833. c5h8-14+ch3=c5h7+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
1834. c5h8-14+ho2=>acrol+c2h4+oh 5.00E+11 0.0 19000.0
1835. c5h8-14+ho2=>c4h6+ch2o+oh 5.00E+11 0.0 19000.0
1836. c5h7+o=acrol+c2h3 2.00E+14 0.0 0.0
1837. c5h7+h=c5h8-13 1.00E+14 0.0 0.0
1838. c5h7+cyc6h12=c5h8-13+cyc6h11 1.00E+12 0.0 10000.0
1839. c5h7+ho2=>acrol+c2h3+oh 2.25E+12 0.0 0.0
1840. c5h7+ho2=>nc4h5+ch2o+oh 2.25E+12 0.0 0.0
1841. c5h7+o2=c2h3chcho+ch2o 1.70E+09 1.0 26400.0
1842. c5h7+o2=ch2hco+acrol 1.70E+09 1.0 26400.0
1843. nc4h9hco+o2=nc4h9co+ho2 2.00E+13 0.5 42200.0
1844. nc4h9hco+oh=nc4h9co+h2o 1.00E+13 0.0 0.0
1845. nc4h9hco+h=nc4h9co+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
1846. nc4h9hco+o=nc4h9co+oh 5.00E+12 0.0 1790.0
1847. nc4h9hco+ho2=nc4h9co+h2o2 2.80E+12 0.0 13600.0
1848. nc4h9hco+ch3=nc4h9co+ch4 1.70E+12 0.0 8440.0
1849. nc4h9hco+ch3o=nc4h9co+ch3oh 1.15E+11 0.0 1280.0
1850. nc4h9hco+ch3o2=nc4h9co+ch3o2h 1.00E+12 0.0 9500.0
1851. nc4h9co+M=co+pc4h9+M 8.64E+15 0.0 14400.0
1852. nc4h9co+ho2=>co2+oh+pc4h9 2.00E+13 0.0 0.0
1853. Dc5h9-2+h=c2c5h10 1.00E+13 0.0 0.0
1854. Dc5h9-2+h=t2c5h10 1.00E+13 0.0 0.0
1855. Dc5h9-2=c5h8-13+h 1.20E+14 0.0 49300.0
1856. Dc5h9-2+o2=c5h8-13+ho2 1.00E+11 0.0 0.0
1857. Dc5h9-2+ho2=>ch3hco+sc3h5+oh 1.00E+13 0.0 0.0
1858. Dc5h9-2+h=c5h8-13+h2 3.16E+12 0.0 0.0
1859. Dc5h9-2+ch3=c5h8-13+ch4 1.00E+13 0.0 0.0
1860. Dc5h9-2+c2h3=c5h8-13+c2h4 4.00E+12 0.0 0.0
1861. Dc5h9-2+c2h5=c5h8-13+c2h6 4.00E+12 0.0 0.0
1862. Dc5h9-2+ac3h5=c5h8-13+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
1863. Dc5h9-2+Cc4h7-1=c5h8-13+c4h8 3.16E+12 0.0 0.0
1864. Ac5h9-1=cyc5h8+h 2.28E+11 0.0 18277.0
1865. Ac5h9-1+ho2=>nc3h7+ch2co+oh 5.00E+12 0.0 8000.0
1866. Ec5h9-1=cyc5h8+h 6.90E-03 0.0 -4213.0
1867. isoph=isope+h 1.00E+14 0.0 44000.0
1868. isoph=c2h4+tc3h5 5.00E+13 0.0 38000.0
1869. isope+ho2=isopy+h2o2 2.00E+05 2.6 13910.0
1870. isope+oh=isopy+h2o 2.00E+07 2.0 5000.0
1871. c4h4+ch3=isopy 2.50E+13 0.0 0.0
1872. isopy=c2h3+ac3h4 2.00E+13 0.0 48700.0
1873. isopy+o2=ch2o+ch2coc2h3 3.08E+09 0.4 16910.0
1874. c6h14=nc3h7+nc3h7 7.36E+28 -3.0 93270.0
1875. c6h14=c2h5+pc4h9 2.75E+29 -3.3 92039.0
1876. c6h14=ch3+Ac5h11 3.83E+24 -1.9 93137.0
1877. c6h14=h+Ac6h13 7.93E+18 -0.4 104311.0
1878. c6h14=h+Bc6h13 1.14E+19 -0.4 102069.0
1879. c6h14=h+Cc6h13 1.37E+19 -0.4 102119.0
1880. c6h14+o2=ho2+Ac6h13 4.00E+13 0.0 50870.0
1881. c6h14+o2=ho2+Bc6h13 8.00E+13 0.0 47690.0
1882. c6h14+o2=ho2+Cc6h13 8.00E+13 0.0 47690.0
1883. c6h14+oh=h2o+Ac6h13 1.05E+10 1.0 1590.0
1884. c6h14+oh=h2o+Bc6h13 9.36E+07 1.6 -35.0
1885. c6h14+oh=h2o+Cc6h13 9.36E+07 1.6 -35.0
1886. c6h14+ho2=h2o2+Ac6h13 3.60E+04 2.5 16683.0
1887. c6h14+ho2=h2o2+Bc6h13 4.00E+04 2.5 14208.0
1888. c6h14+ho2=h2o2+Cc6h13 4.00E+04 2.5 14208.0
1889. c6h14+h=h2+Ac6h13 5.70E+07 2.0 7700.0
1890. c6h14+h=h2+Bc6h13 1.80E+07 2.0 5000.0
1891. c6h14+h=h2+Cc6h13 1.80E+07 2.0 5000.0
1892. o+c6h14=oh+Ac6h13 1.00E+14 0.0 7850.0
1893. o+c6h14=oh+Bc6h13 5.20E+13 0.0 5200.0
1894. o+c6h14=oh+Cc6h13 5.20E+13 0.0 5200.0
1895. c6h14+ch3=ch4+Ac6h13 6.00E-01 4.0 8200.0
1896. c6h14+ch3=ch4+Bc6h13 4.00E+11 0.0 9600.0
1897. c6h14+ch3=ch4+Cc6h13 4.00E+11 0.0 9600.0
1898. c6h14+c2h5=c2h6+Ac6h13 6.00E+11 0.0 13500.0
1899. c6h14+c2h5=c2h6+Bc6h13 4.00E+11 0.0 11000.0
1900. c6h14+c2h5=c2h6+Cc6h13 4.00E+11 0.0 11000.0
1901. c6h14+hco=ch2o+Ac6h13 2.00E+05 2.5 18500.0
1902. c6h14+hco=ch2o+Bc6h13 2.20E+07 1.9 17000.0
1903. c6h14+hco=ch2o+Cc6h13 2.20E+07 1.9 17000.0
1904. c6h14+ch3o=ch3oh+Ac6h13 3.20E+11 0.0 7300.0
1905. c6h14+ch3o=ch3oh+Bc6h13 2.90E+11 0.0 4500.0
1906. c6h14+ch3o=ch3oh+Cc6h13 2.90E+11 0.0 4500.0
1907. c6h14+ch2oh=ch3oh+Ac6h13 2.00E+02 3.0 14000.0
1908. c6h14+ch2oh=ch3oh+Bc6h13 1.20E+02 3.0 12000.0
1909. c6h14+ch2oh=ch3oh+Cc6h13 1.20E+02 3.0 12000.0
1910. c6h14+ch3o2=ch3o2h+Ac6h13 1.20E+13 0.0 20000.0
1911. c6h14+ch3o2=ch3o2h+Bc6h13 6.00E+12 0.0 17500.0
1912. c6h14+ch3o2=ch3o2h+Cc6h13 6.00E+12 0.0 17500.0
1913. c6h14+ch2hco=ch3hco+Ac6h13 6.00E+11 0.0 13700.0
1914. c6h14+ch2hco=ch3hco+Bc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1915. c6h14+ch2hco=ch3hco+Cc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1916. c6h14+ch3co=ch3hco+Ac6h13 3.00E+11 0.0 15000.0
1917. c6h14+ch3co=ch3hco+Bc6h13 2.00E+11 0.0 12700.0
1918. c6h14+ch3co=ch3hco+Cc6h13 2.00E+11 0.0 12700.0
1919. c6h14+nc3h7=c3h8+Ac6h13 6.00E+11 0.0 13700.0
1920. c6h14+nc3h7=c3h8+Bc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1921. c6h14+nc3h7=c3h8+Cc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1922. c6h14+pc4h9=c4h10+Ac6h13 6.00E+11 0.0 13700.0
1923. c6h14+pc4h9=c4h10+Bc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1924. c6h14+pc4h9=c4h10+Cc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1925. c6h14+Ac5h11=nc5h12+Ac6h13 6.00E+11 0.0 13700.0
1926. c6h14+Ac5h11=nc5h12+Bc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1927. c6h14+Ac5h11=nc5h12+Cc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1928. c6h14+Ac6h13=c6h14+Bc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1929. c6h14+Ac6h13=c6h14+Cc6h13 4.00E+11 0.0 11400.0
1930. c6h14+Bc6h13=c6h14+Cc6h13 4.00E+11 0.0 12400.0
1931. Ac6h13=pc4h9+c2h4 1.02E+12 0.3 27276.0
1932. Bc6h13=nc3h7+c3h6 4.47E+11 0.6 28047.0
1933. Cc6h13=c2h5+c4h8 3.55E+12 0.3 28246.0
1934. Cc6h13=ch3+c5h10 8.13E+10 0.8 29651.0
1935. Ac6h13=h+c6h12-1 1.39E+16 -0.9 36837.0
1936. Bc6h13=h+c6h12-1 1.63E+16 -0.8 37690.0
1937. Bc6h13=h+c6h12-2 8.76E+15 -1.2 37213.0
1938. Cc6h13=h+c6h12-2 7.33E+15 -1.2 37163.0
1939. Cc6h13=h+c6h12-3 7.33E+15 -1.2 37163.0
1940. Ac6h13+o2=c6h12-1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
1941. Bc6h13+o2=c6h12-1+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1942. Bc6h13+o2=c6h12-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1943. Cc6h13+o2=c6h12-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1944. Cc6h13+o2=c6h12-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1945. Ac6h13=Bc6h13 1.82E+02 2.5 10961.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.70E+01 2.9 13380.0
1946. Ac6h13=Cc6h13 6.92E+00 3.2 16559.0
Reverse Arrhenius coefficients: 7.08E+00 3.2 18938.0
1947. c6h12-1=nc3h7+ac3h5 2.50E+16 0.0 70000.0
1948. c2h3+pc4h9=c6h12-1 1.00E+13 0.0 0.0
1949. c6h12-1=c3h6+c3h6 4.00E+12 0.0 57430.0
1950. Cc6h11-1+h=c6h12-1 1.00E+13 0.0 0.0
1951. c6h12-1=Dc4h7-1+c2h5 1.31E+23 -1.9 87446.0
1952. c6h12-1=Ec5h9-1+ch3 9.65E+21 -1.5 89648.0
1953. c6h12-1+oh=Ac5h11+ch2o 1.00E+11 0.0 -4000.0
1954. c6h12-1+o=Ac5h11+hco 1.00E+11 0.0 -1050.0
1955. c6h12-1+o2=Cc6h11-1+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
1956. c6h12-1+ho2=h2o2+Cc6h11-1 6.40E+03 2.6 12400.0
1957. c6h12-1+o=oh+Cc6h11-1 4.00E+13 0.0 4000.0
1958. c6h12-1+h=h2+Cc6h11-1 5.40E+04 2.5 -1900.0

1959. c6h12-1+oh=h2o+Cc6h11-1	3.00E+06	2.0	-1520.0
1960. c6h12-1+ch3=ch4+Cc6h11-1	1.00E+11	0.0	7300.0
1961. c6h12-1+c2h3=c2h4+Cc6h11-1	2.00E+11	0.0	6800.0
1962. c6h12-1+nc3h7=c3h8+Cc6h11-1	1.00E+11	0.0	8300.0
1963. c6h12-1+h=Dc6h11-1+h2	9.00E+06	2.0	5000.0
1964. c6h12-1+h=Bc6h11-1+h2	9.00E+06	2.0	5000.0
1965. c6h12-1+h=Fc6h11-1+h2	2.80E+07	2.0	7700.0
1966. c6h12-1+oh=Fc6h11-1+h2o	2.67E+06	2.0	450.0
1967. c6h12-1+oh=Ec6h11-1+h2o	2.60E+06	2.0	-770.0
1968. c6h12-1+oh=Dc6h11-1+h2o	2.60E+06	2.0	-770.0
1969. c6h12-1+ho2=Fc6h11-1+h2o2	6.00E+11	0.0	17000.0
1970. c6h12-1+ho2=Bc6h11-1+h2o2	4.00E+11	0.0	15000.0
1971. c6h12-1+ho2=Dc6h11-1+h2o2	4.00E+11	0.0	15000.0
1972. c6h12-1+ch3=Fc6h11-1+ch4	3.00E-01	4.0	8200.0
1973. c6h12-1+ch3=Ec6h11-1+ch4	2.00E+11	0.0	9600.0
1974. c6h12-1+ch3=Dc6h11-1+ch4	2.00E+11	0.0	9600.0
1975. Dc6h11-1=c2h3+c4h8	2.00E+13	0.0	35500.0
1976. Dc6h11-1=ch3+c5h8-14	2.00E+13	0.0	31000.0
1977. Ec6h11-1=ac3h5+c3h6	3.30E+13	0.0	22500.0
1978. Fc6h11-1=c2h4+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	28700.0
1979. c6h12-1+oh=h2o+ch3+c5h8-14	1.12E+06	2.0	-1391.0
1980. c6h12-1+oh=h2o+ac3h5+c3h6	1.00E+06	2.0	-597.0
1981. c6h12-1+o2=ho2+Fc6h11-1	2.10E+13	0.0	51300.0
1982. c6h12-2+o2=Cc6h11-1+ho2	1.95E+12	0.0	39000.0
1983. c6h12-2+ho2=Cc6h11-1+h2o2	1.50E+11	0.0	14190.0
1984. c6h12-2+oh=Cc6h11-1+h2o	7.70E+05	2.2	622.0
1985. c6h12-2+o=Cc6h11-1+oh	1.75E+11	0.7	5884.0
1986. c6h12-2+h=Cc6h11-1+h2	6.46E+12	0.0	4445.0
1987. c6h12-2+ch3=Cc6h11-1+ch4	1.60E+11	0.0	8800.0
1988. c6h12-2+c2h5=Cc6h11-1+c2h6	1.00E+11	0.0	9800.0
1989. c6h12-2+c2h3=Cc6h11-1+c2h4	2.21E+00	3.5	4682.0
1990. c6h12-2+ho2=h2o2+Bc6h11-3	1.00E+11	0.0	17060.0
1991. c6h12-2+o=oh+Bc6h11-3	4.00E+13	0.0	4000.0
1992. c6h12-2+h=h2+Bc6h11-3	6.55E+12	0.0	4445.0
1993. c6h12-2+oh=h2o+Bc6h11-3	4.19E+06	2.0	-543.0
1994. c6h12-2+ch3=ch4+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	6800.0
1995. c6h12-2+c2h3=c2h4+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	6800.0
1996. c6h12-2+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	8300.0
1997. c6h12-3+ho2=h2o2+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	17060.0
1998. c6h12-3+o=oh+Bc6h11-3	8.00E+13	0.0	4000.0
1999. c6h12-3+h=h2+Bc6h11-3	1.31E+13	0.0	4445.0
2000. c6h12-3+oh=h2o+Bc6h11-3	8.37E+06	2.0	-543.0
2001. c6h12-3+ch3=ch4+Bc6h11-3	4.00E+11	0.0	6800.0
2002. c6h12-3+c2h3=c2h4+Bc6h11-3	4.00E+11	0.0	6800.0
2003. c6h12-3+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3	4.00E+11	0.0	8300.0
2004. Cc6h11-1=c2h5+c4h6	1.30E+13	0.0	35900.0
2005. Cc6h11-1+ho2=>nc3h7+acrol+oh	1.00E+12	0.0	8000.0
2006. Fc6h11-1=cyc6h11	1.00E+08	0.9	5900.0
2007. c2h4+Ac4h7-1=Ac6h11-3	2.00E+11	0.0	2010.0
2008. Bc6h11-3=c5h8-13+ch3	2.00E+13	0.0	42320.0
2009. ac3h5+ac3h5=c6h10-15	1.02E+13	0.0	-263.0
2010. Cc4h7-1+c2h3=c6h10-15	1.00E+12	0.0	0.0
2011. c6h10-15+o2=c6h9+ho2	1.00E+11	0.0	25050.0
2012. c6h10-15+ho2=c6h9+h2o2	1.64E+11	0.0	12583.0
2013. c6h10-15+oh=c6h9+h2o	5.60E+12	0.0	861.0
2014. c6h10-15+h=c6h9+h2	1.00E+14	0.0	3900.0
2015. c6h10-15+ch3=c6h9+ch4	2.50E+11	0.0	8300.0
2016. c6h10-15+c2h5=c6h9+c2h6	1.00E+11	0.0	8300.0
2017. c6h10-15+c2h3=c6h9+c2h4	6.30E+12	0.0	13000.0
2018. c6h10-15+ac3h5=c6h9+c3h6	1.00E+12	0.0	10500.0
2019. c6h10-13=>c4h6+c2h4	2.07E+13	0.4	38219.3
2020. c6h10-13=>c2h4+c2h2+c2h4	2.07E+13	0.4	38219.3
2021. c6h10-13=c2h2+c4h8	1.00E+14	0.0	75000.0
2022. c5h11hco+o2=c5h11co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
2023. c5h11hco+oh=c5h11co+h2o	1.00E+13	0.0	0.0
2024. c5h11hco+h=c5h11co+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
2025. c5h11hco+o=c5h11co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
2026. c5h11hco+ho2=c5h11co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
2027. c5h11hco+ch3=c5h11co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
2028. c5h11hco+ch3o=c5h11co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
2029. c5h11hco+ch3o2=c5h11co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
2030. c5h11co+M=co+Ac5h11+M	8.64E+15	0.0	14400.0
2031. c5h11co+ho2=>co2+oh+Ac5h11	2.00E+13	0.0	0.0
2032. c6h7C=Lc6h7	2.50E+14	0.7	41800.0
2033. Lc6h7=c2h2+nc4h5	3.16E+13	0.0	43100.0
2034. Lc6h7=Lc6h6+h	3.98E+12	0.0	36500.0
2035. Lc6h7+oh=Lc6h6+h2o	2.00E+07	2.0	1000.0
2036. Lc6h7+h=Lc6h6+h2	2.00E+07	2.0	1000.0
2037. Lc6h7+o2=chocho+nc4h5	1.00E+12	0.0	0.0
2038. Lc6h7+o2=Lc6h6+ho2	1.00E+07	2.0	10000.0
2039. Lc6h6+o2=>acrol+hco+c2h	2.00E+08	1.5	30200.0
2040. c6h5=U-c6h5	3.00E+13	0.0	72896.7
2041. U-c6h5=c2h2+nc4h3	3.16E+13	0.0	43100.0
2042. U-c6h5=Lc6h4+h	3.98E+12	0.0	36500.0
2043. Lc6h4+o2=>2hco+2c2h	2.00E+08	1.5	30200.0
2044. nc7h16=nc3h7+pc4h9	1.22E+27	-3.0	89757.5
2045. nc7h16=c2h5+Ac5h11	4.49E+25	-2.6	88135.0
2046. nc7h16=ch3+Ac6h13	5.27E+22	-1.8	89834.0
2047. nc7h16=h+Ac7h15	1.07E+17	-0.3	101045.0
2048. nc7h16=h+Bc7h15	1.60E+17	-0.3	98008.0
2049. nc7h16=h+Cc7h15	2.02E+17	-0.3	98866.0
2050. nc7h16=h+Dc7h15	1.03E+17	-0.3	98868.0
2051. nc7h16+o2=Ac7h15+ho2	4.00E+13	0.0	50870.0
2052. nc7h16+o2=Bc7h15+ho2	8.00E+13	0.0	47690.0
2053. nc7h16+o2=Cc7h15+ho2	8.00E+13	0.0	47690.0
2054. nc7h16+o2=Dc7h15+ho2	4.00E+13	0.0	47690.0
2055. nc7h16+oh=h2o+Ac7h15	1.05E+10	1.0	1590.0
2056. nc7h16+oh=h2o+Bc7h15	9.36E+07	1.6	-35.0
2057. nc7h16+oh=h2o+Cc7h15	9.36E+07	1.6	-35.0
2058. nc7h16+oh=h2o+Dc7h15	4.68E+07	1.6	-35.0
2059. nc7h16+ho2=h2o2+Ac7h15	3.60E+04	2.5	16683.0
2060. nc7h16+ho2=h2o2+Bc7h15	4.00E+04	2.5	14208.0
2061. nc7h16+ho2=h2o2+Cc7h15	4.00E+04	2.5	14208.0
2062. nc7h16+ho2=h2o2+Dc7h15	2.00E+04	2.5	14208.0
2063. nc7h16+h=h2+Ac7h15	5.70E+07	2.0	7700.0
2064. nc7h16+h=h2+Bc7h15	1.80E+07	2.0	5000.0
2065. nc7h16+h=h2+Cc7h15	1.80E+07	2.0	5000.0
2066. nc7h16+h=h2+Dc7h15	9.00E+06	2.0	5000.0
2067. o+nc7h16=oh+Ac7h15	1.00E+14	0.0	7850.0
2068. o+nc7h16=oh+Bc7h15	5.20E+13	0.0	5200.0
2069. o+nc7h16=oh+Cc7h15	5.20E+13	0.0	5200.0
2070. o+nc7h16=oh+Dc7h15	2.60E+13	0.0	5200.0
2071. nc7h16+ch3=ch4+Ac7h15	6.00E-01	4.0	8200.0
2072. nc7h16+ch3=ch4+Bc7h15	4.00E+11	0.0	9600.0
2073. nc7h16+ch3=ch4+Cc7h15	4.00E+11	0.0	9600.0
2074. nc7h16+ch3=ch4+Dc7h15	2.00E+11	0.0	9600.0
2075. nc7h16+c2h5=c2h6+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13500.0
2076. nc7h16+c2h5=c2h6+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11000.0
2077. nc7h16+c2h5=c2h6+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11000.0
2078. nc7h16+c2h5=c2h6+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11000.0
2079. nc7h16+hco=ch2o+Ac7h15	2.00E+05	2.5	18500.0
2080. nc7h16+hco=ch2o+Bc7h15	2.20E+07	1.9	17000.0
2081. nc7h16+hco=ch2o+Cc7h15	2.20E+07	1.9	17000.0
2082. nc7h16+hco=ch2o+Dc7h15	1.10E+07	1.9	17000.0
2083. nc7h16+ch3o=ch3oh+Ac7h15	3.20E+11	0.0	7300.0
2084. nc7h16+ch3o=ch3oh+Bc7h15	2.90E+11	0.0	4500.0
2085. nc7h16+ch3o=ch3oh+Cc7h15	2.90E+11	0.0	4500.0
2086. nc7h16+ch3o=ch3oh+Dc7h15	1.45E+11	0.0	4500.0
2087. nc7h16+ch2oh=ch3oh+Ac7h15	2.00E+02	3.0	14000.0
2088. nc7h16+ch2oh=ch3oh+Bc7h15	1.20E+02	3.0	12000.0
2089. nc7h16+ch2oh=ch3oh+Cc7h15	1.20E+02	3.0	12000.0
2090. nc7h16+ch2oh=ch3oh+Dc7h15	6.00E+01	3.0	12000.0
2091. nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Ac7h15	1.20E+13	0.0	20000.0
2092. nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Bc7h15	6.00E+12	0.0	17500.0
2093. nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Cc7h15	6.00E+12	0.0	17500.0
2094. nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Dc7h15	3.00E+12	0.0	17500.0
2095. nc7h16+ch2hco=ch3hco+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
2096. nc7h16+ch2hco=ch3hco+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2097. nc7h16+ch2hco=ch3hco+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2098. nc7h16+ch2hco=ch3hco+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
2099. nc7h16+ch3co=ch3hco+Ac7h15	3.00E+11	0.0	15000.0
2100. nc7h16+ch3co=ch3hco+Bc7h15	2.00E+11	0.0	12700.0
2101. nc7h16+ch3co=ch3hco+Cc7h15	2.00E+11	0.0	12700.0
2102. nc7h16+ch3co=ch3hco+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12700.0
2103. nc7h16+nc3h7=c3h8+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
2104. nc7h16+nc3h7=c3h8+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2105. nc7h16+nc3h7=c3h8+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2106. nc7h16+nc3h7=c3h8+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
2107. nc7h16+pc4h9=c4h10+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
2108. nc7h16+pc4h9=c4h10+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2109. nc7h16+pc4h9=c4h10+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2110. nc7h16+pc4h9=c4h10+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
2111. nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
2112. nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2113. nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2114. nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
2115. nc7h16+Ac6h13=c6h14+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
2116. nc7h16+Ac6h13=c6h14+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2117. nc7h16+Ac6h13=c6h14+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
2118. nc7h16+Ac6h13=c6h14+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
2119. nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Bc7h15	4.00E+11	0.0	12400.0
2120. nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Cc7h15	4.00E+11	0.0	12400.0
2121. nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12400.0
2122. nc7h16+Bc7h15=nc7h16+Cc7h15	4.00E+11	0.0	12400.0
2123. nc7h16+Bc7h15=nc7h16+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12400.0
2124. nc7h16+Cc7h15=nc7h16+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E+11	0.0	12400.0
2125. Ac7h15=Ac5h11+c2h4	9.12E+11	0.3	27240.5
2126. Bc7h15=pc4h9+c3h6	6.02E+10	0.8	27823.0
2127. Cc7h15=nc3h7+c4h8	5.50E+11	0.6	28087.0
2128. Cc7h15=ch3+c6h12-1	9.55E+09	1.1	29391.0
2129. Dc7h15=c2h5+c5h10	1.70E+10	1.1	27026.0
2130. Ac7h15=h+c7h14-1	3.00E+13	0.0	38000.0
2131. Bc7h15=h+c7h14-1	3.00E+13	0.0	38000.0
2132. Bc7h15=h+c7h14-2	3.00E+13	0.0	38000.0
2133. Cc7h15=h+c7h14-2	3.00E+13	0.0	38000.0
2134. Cc7h15=h+c7h14-3	3.00E+13	0.0	38000.0
2135. Dc7h15=h+c7h14-3	6.00E+13	0.0	38000.0
2136. Ac7h15+o2=c7h14-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
2137. Bc7h15+o2=c7h14-1+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
2138. Bc7h15+o2=c7h14-2+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
2139. Cc7h15+o2=c7h14-2+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
2140. Cc7h15+o2=c7h14-3+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
2141. Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
2142. Ac7h15=Bc7h15	2.95E+00	3.1	11017.0
Reverse Arrhenius coefficients:	3.31E+00	3.1	13073.0
2143. Ac7h15=Cc7h15	2.29E+01	2.8	10757.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.86E+00	3.2	12849.0
2144. Ac7h15=Dc7h15	5.13E+00	3.2	16849.0
Reverse Arrhenius coefficients:	8.34E-01	3.6	18942.0
2145. Bc7h15=Cc7h15	1.41E+00	3.3	16146.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.41E+00	3.3	16146.0
2146. c2h3+Ac5h11=c7h14-1	1.00E+13	0.0	0.0
2147. c7h14-1=c3h6+c4h8	4.00E+12	0.0	57430.0
2148. c7h14-1=ac3h5+pc4h9	2.50E+16	0.0	70000.0
2149. c7h14-1=Dc4h7-1+nc3h7	1.00E+16	0.0	71000.0
2150. c7h14-1=Ec5h9-1+c2h5	1.00E+16	0.0	71000.0
2151. c7h14-1=Fc6h11-1+ch3	1.00E+16	0.0	71000.0
2152. Cc7h13-1+h=c7h14-1	1.00E+13	0.0	0.0
2153. Dc7h13-2+h=c7h14-2	1.00E+13	0.0	0.0
2154. Ec7h13-3+h=c7h14-3	1.00E+13	0.0	0.0
2155. c7h14-1+ho2=>oh+ch2o+c6h12-1	2.50E+12	1.0	25000.0
2156. c7h14-2+ho2=>oh+ch3hco+c5h10	2.50E+12	1.0	25000.0
2157. c7h14-2+ho2=>oh+c2h4+nc4h9hco	2.50E+12	1.0	25000.0
2158. c7h14-3+ho2=>oh+ethco+c4h8	2.50E+12	1.0	25000.0
2159. c7h14-3+ho2=>oh+c3h6+nc3h7hco	2.50E+12	1.0	25000.0
2160. c7h14-1+oh=ch2o+Ac6h13	1.00E+11	0.0	-4000.0
2161. c7h14-1+oh=ch3+c5h11hco	1.00E+11	0.0	-4000.0
2162. c7h14-2+oh=ch3hco+Ac5h11	1.40E+12	0.0	-900.0
2163. c7h14-2+oh=c2h5+nc4h9hco	1.40E+12	0.0	-900.0
2164. c7h14-3+oh=ethco+pc4h9	1.40E+12	0.0	-900.0
2165. c7h14-3+oh=nc3h7+nc3h7hco	1.40E+12	0.0	-900.0
2166. c7h14-1+o=ch2o+c6h12-1	3.40E+07	1.8	550.0
2167. c7h14-2+o=ch3hco+c5h10	3.40E+07	1.8	550.0
2168. c7h14-2+o=c2h4+nc4h9hco	3.40E+07	1.8	550.0
2169. c7h14-3+o=ethco+c4h8	3.40E+07	1.8	550.0
2170. c7h14-3+o=c3h6+nc3h7hco	3.40E+07	1.8	550.0
2171. c7h14-1+o2=Cc7h13-1+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
2172. c7h14-1+h=h2+Cc7h13-1	5.40E+04	2.5	-1900.0
2173. c7h14-1+oh=h2o+Cc7h13-1	3.00E+06	2.0	-1520.0
2174. c7h14-1+ho2=h2o2+Cc7h13-1	6.40E+03	2.6	12400.0
2175. c7h14-1+ch3=ch4+Cc7h13-1	1.00E+11	0.0	7300.0
2176. c7h14-1+c2h3=c2h4+Cc7h13-1	2.00E+11	0.0	6800.0
2177. c7h14-1+c2h5=c2h6+Cc7h13-1	1.00E+11	0.0	8300.0
2178. c7h14-1+o=oh+Cc7h13-1	4.00E+13	0.0	4000.0
2179. c7h14-2+h=h2+Cc7h13-1	6.55E+12	0.0	4445.0
2180. c7h14-2+oh=h2o+Cc7h13-1	6.00E+13	0.0	1230.0
2181. c7h14-2+ho2=h2o2+Cc7h13-1	1.02E+04	2.5	12340.5

2182. c7h14-2+ch3=ch4+Cc7h13-1 2.00E+11 0.0 6800.0
2183. c7h14-2+c2h3=c2h4+Cc7h13-1 2.00E+11 0.0 6800.0
2184. c7h14-2+c2h5=c2h6+Cc7h13-1 1.00E+11 0.0 8300.0
2185. c7h14-2+o=oh+Cc7h13-1 4.00E+13 0.0 4000.0
2186. c7h14-2+h=h2+Dc7h13-2 6.55E+12 0.0 4445.0
2187. c7h14-2+oh=h2o+Dc7h13-2 6.00E+13 0.0 1230.0
2188. c7h14-2+ho2=h2o2+Dc7h13-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2189. c7h14-2+ch3=ch4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
2190. c7h14-2+c2h3=c2h4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
2191. c7h14-2+c2h5=c2h6+Dc7h13-2 1.00E+11 0.0 8300.0
2192. c7h14-2+o=oh+Dc7h13-2 4.00E+13 0.0 4000.0
2193. c7h14-3+h=h2+Dc7h13-2 6.55E+12 0.0 4445.0
2194. c7h14-3+oh=h2o+Dc7h13-2 6.00E+13 0.0 1230.0
2195. c7h14-3+ho2=h2o2+Dc7h13-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2196. c7h14-3+ch3=ch4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
2197. c7h14-3+c2h3=c2h4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
2198. c7h14-3+c2h5=c2h6+Dc7h13-2 1.00E+11 0.0 8300.0
2199. c7h14-3+o=oh+Dc7h13-2 4.00E+13 0.0 4000.0
2200. c7h14-3+h=h2+Ec7h13-3 6.55E+12 0.0 4445.0
2201. c7h14-3+oh=h2o+Ec7h13-3 6.00E+13 0.0 1230.0
2202. c7h14-3+ho2=h2o2+Ec7h13-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2203. c7h14-3+ch3=ch4+Ec7h13-3 2.00E+11 0.0 6800.0
2204. c7h14-3+c2h3=c2h4+Ec7h13-3 2.00E+11 0.0 6800.0
2205. c7h14-3+c2h5=c2h6+Ec7h13-3 1.00E+11 0.0 8300.0
2206. c7h14-3+o=oh+Ec7h13-3 4.00E+13 0.0 4000.0
2207. c7h14-1+oh=c7h14rohAB 2.76E+12 0.0 -1042.0
2208. c7h14rohAB+o2=c7h14qjohAB 1.00E+12 0.0 -1100.0
2209. c7h14qjohAB=>oh+ch2o+c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2210. c7h14-2+oh=c7h14rohBC 2.76E+12 0.0 -1042.0
2211. c7h14rohBC+o2=c7h14qjohBC 1.00E+12 0.0 -1100.0
2212. c7h14qjohBC=>oh+ch3hco+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2213. c7h14-3+oh=c7h14rohCD 2.76E+12 0.0 -1042.0
2214. c7h14rohCD+o2=c7h14qjohCD 1.00E+12 0.0 -1100.0
2215. c7h14qjohCD=>oh+ethco+nc3h7hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2216. Cc7h13-1=c4h6+nc3h7 1.34E+15 -0.5 38320.0
2217. Dc7h13-2=c5h8-13+c2h5 2.50E+13 0.0 35000.0
2218. Ec7h13-3=c6h10-13+ch3 2.50E+13 0.0 35000.0
2219. Cc7h13-1+ho2=>pc4h9+acrol+oh 1.00E+12 0.0 8000.0
2220. c6h13hco+h=h2+c6h13co 4.00E+13 0.0 4200.0
2221. c6h13hco+oh=h2o+c6h13co 4.20E+12 0.0 500.0
2222. c6h13hco+ho2=h2o2+c6h13co 1.00E+12 0.0 10000.0
2223. c6h13hco+ch3=ch4+c6h13co 2.00E-06 5.6 2500.0
2224. c6h13hco+c2h5=c2h6+c6h13co 1.30E+12 0.0 8500.0
2225. c6h13co+M=co+Ac6h13+M 8.64E+15 0.0 14400.0
2226. c6h13co+ho2=>co2+oh+Ac6h13 2.00E+13 0.0 0.0
2227. mhd=>Cc4h7-1+ac3h5 5.00E+15 0.0 72800.0
2228. mhd=>ch3+c6h9 5.00E+16 0.0 73000.0
2229. p2c4h614=p2c4h513+h 4.26E+13 0.0 38600.0
2230. p2c4h513=>isopy+c2h5 1.00E+16 0.0 71000.0
2231. p2c4h513+h=P2c4h4134+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
2232. p2c4h513+oh=P2c4h4134+h2o 3.00E+12 0.0 1230.0
2233. p2c4h513+ho2=P2c4h4134+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
2234. p2c4h513+o2=P2c4h4134+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
2235. p2c4h513+ch3=P2c4h4134+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
2236. P2c4h4134=>c2h3+c5h8-12 1.00E+11 0.0 37000.0
2237. c5h8-12=>c3h3+c2h5 2.00E+15 0.0 75000.0
2238. c5h8-12=c5h8-13 2.50E+13 0.0 63000.0
2239. Ac7h13-3=c2h4+Ac5h9-1 1.00E+11 0.0 37000.0
2240. Ac7h13-3=c7h12-13+h 4.26E+13 0.0 38600.0
2241. Dc7h13-1=c2h3+c5h10 1.00E+11 0.0 37000.0
2242. Dc7h13-1=c7h12-13+h 4.26E+13 0.0 38600.0
2243. c7h12-16=ac3h5+Dc4h7-1 1.00E+16 0.0 71000.0
2244. c7h12-13=c5h7+c2h5 1.00E+16 0.0 71000.0
2245. nc8h18=pc4h9+pc4h9 2.00E+17 0.0 83180.0
2246. nc8h18=nc3h7+Ac5h11 2.00E+17 0.0 83400.0
2247. nc8h18=c2h5+Ac6h13 2.00E+17 0.0 83680.0
2248. nc8h18=ch3+Ac7h15 2.00E+17 0.0 85570.0
2249. nc8h18=h+Ac8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
2250. nc8h18=h+Bc8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
2251. nc8h18=h+Cc8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
2252. nc8h18=h+Dc8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
2253. nc8h18+o2=ho2+Ac8h17 4.00E+13 0.0 50870.0
2254. nc8h18+o2=ho2+Bc8h17 8.00E+13 0.0 47690.0
2255. nc8h18+o2=ho2+Cc8h17 8.00E+13 0.0 47690.0
2256. nc8h18+o2=ho2+Dc8h17 8.00E+13 0.0 47690.0
2257. nc8h18+oh=h2o+Ac8h17 1.05E+10 1.0 1590.0
2258. nc8h18+oh=h2o+Bc8h17 9.36E+07 1.6 -35.0
2259. nc8h18+oh=h2o+Cc8h17 9.36E+07 1.6 -35.0
2260. nc8h18+oh=h2o+Dc8h17 9.36E+07 1.6 -35.0
2261. nc8h18+ho2=h2o2+Ac8h17 3.60E+04 2.5 16683.0
2262. nc8h18+ho2=h2o2+Bc8h17 4.00E+04 2.5 14208.0
2263. nc8h18+ho2=h2o2+Cc8h17 4.00E+04 2.5 14208.0
2264. nc8h18+ho2=h2o2+Dc8h17 4.00E+04 2.5 14208.0
2265. nc8h18+h=h2+Ac8h17 5.70E+07 2.0 7700.0
2266. nc8h18+h=h2+Bc8h17 1.80E+07 2.0 5000.0
2267. nc8h18+h=h2+Cc8h17 1.80E+07 2.0 5000.0
2268. nc8h18+h=h2+Dc8h17 1.80E+07 2.0 5000.0
2269. o+nc8h18=oh+Ac8h17 1.00E+14 0.0 7850.0
2270. o+nc8h18=oh+Bc8h17 5.20E+13 0.0 5200.0
2271. o+nc8h18=oh+Cc8h17 5.20E+13 0.0 5200.0
2272. o+nc8h18=oh+Dc8h17 5.20E+13 0.0 5200.0
2273. nc8h18+ch3=ch4+Ac8h17 6.00E-01 4.0 8200.0
2274. nc8h18+ch3=ch4+Bc8h17 4.00E+11 0.0 9600.0
2275. nc8h18+ch3=ch4+Cc8h17 4.00E+11 0.0 9600.0
2276. nc8h18+ch3=ch4+Dc8h17 4.00E+11 0.0 9600.0
2277. nc8h18+c2h5=c2h6+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13500.0
2278. nc8h18+c2h5=c2h6+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11000.0
2279. nc8h18+c2h5=c2h6+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11000.0
2280. nc8h18+c2h5=c2h6+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11000.0
2281. nc8h18+hco=ch2o+Ac8h17 2.00E+05 2.5 18500.0
2282. nc8h18+hco=ch2o+Bc8h17 2.20E+07 1.9 17000.0
2283. nc8h18+hco=ch2o+Cc8h17 2.20E+07 1.9 17000.0
2284. nc8h18+hco=ch2o+Dc8h17 2.20E+07 1.9 17000.0
2285. nc8h18+ch3o=ch3oh+Ac8h17 3.20E+11 0.0 7300.0
2286. nc8h18+ch3o=ch3oh+Bc8h17 2.90E+11 0.0 4500.0
2287. nc8h18+ch3o=ch3oh+Cc8h17 2.90E+11 0.0 4500.0
2288. nc8h18+ch3o=ch3oh+Dc8h17 2.90E+11 0.0 4500.0
2289. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Ac8h17 2.00E+02 3.0 14000.0
2290. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Bc8h17 1.20E+02 3.0 12000.0
2291. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Cc8h17 1.20E+02 3.0 12000.0
2292. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Dc8h17 1.20E+02 3.0 12000.0
2293. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Ac8h17 1.20E+13 0.0 20000.0
2294. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Bc8h17 6.00E+12 0.0 17500.0
2295. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Cc8h17 6.00E+12 0.0 17500.0
2296. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Dc8h17 6.00E+12 0.0 17500.0
2297. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13700.0
2298. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2299. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2300. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2301. nc8h18+ch3co=ch3hco+Ac8h17 3.00E+11 0.0 15000.0
2302. nc8h18+ch3co=ch3hco+Bc8h17 2.00E+11 0.0 12700.0
2303. nc8h18+ch3co=ch3hco+Cc8h17 2.00E+11 0.0 12700.0
2304. nc8h18+ch3co=ch3hco+Dc8h17 2.00E+11 0.0 12700.0
2305. nc8h18+nc3h7=c3h8+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13700.0
2306. nc8h18+nc3h7=c3h8+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2307. nc8h18+nc3h7=c3h8+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2308. nc8h18+nc3h7=c3h8+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2309. nc8h18+pc4h9=c4h10+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13700.0
2310. nc8h18+pc4h9=c4h10+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2311. nc8h18+pc4h9=c4h10+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2312. nc8h18+pc4h9=c4h10+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
2313. nc8h18+ac3h5=c3h6+Ac8h17 1.20E+02 3.3 19840.0
2314. nc8h18+ac3h5=c3h6+Bc8h17 8.00E+01 3.3 18170.0
2315. nc8h18+ac3h5=c3h6+Cc8h17 8.00E+01 3.3 18170.0
2316. nc8h18+ac3h5=c3h6+Dc8h17 8.00E+01 3.3 18170.0
2317. Ac8h17=Ac6h13+c2h4 9.12E+11 0.3 27240.5
2318. Bc8h17=Ac5h11+c3h6 6.02E+10 0.8 27822.8
2319. Cc8h17=pc4h9+c4h8 2.04E+13 0.0 28496.5
2320. Cc8h17=ch3+c7h14-1 9.55E+09 1.1 29390.7
2321. Dc8h17=nc3h7+c5h10 5.50E+11 0.6 28087.1
2322. Dc8h17=c2h5+c6h12-1 8.51E+09 1.1 27025.9
2323. Ac8h17=h+c8h16-1 1.24E+18 -1.5 37436.0
2324. Dc8h17=h+c8h16-3 9.80E+14 -0.7 35922.0
2325. Dc8h17=h+c8h16-4 5.14E+14 -0.7 35928.0
2326. Cc8h17=h+c8h16-3 9.80E+14 -0.7 35922.0
2327. Cc8h17=h+c8h16-2 1.46E+15 -0.7 36050.0
2328. Bc8h17=h+c8h16-2 2.16E+15 -0.7 36144.0
2329. Bc8h17=h+c8h16-1 1.79E+18 -1.4 38332.0
2330. Ac8h17+o2=c8h16-1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2331. Bc8h17+o2=c8h16-2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2332. Bc8h17+o2=c8h16-1+ho2 8.00E+09 0.0 -2000.0
2333. Cc8h17+o2=c8h16-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2334. Cc8h17+o2=c8h16-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2335. Dc8h17+o2=c8h16-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2336. Dc8h17+o2=c8h16-4+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2337. Ac8h17=Cc8h17 2.95E+00 3.1 11017.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.31E+00 3.1 13074.0
2338. Ac8h17=Dc8h17 6.52E-03 4.0 9665.0
Reverse Arrhenius coefficients: 5.30E-04 4.3 11757.0
2339. Bc8h17=Cc8h17 1.86E+00 3.3 13199.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+01 3.0 13165.0
2340. Bc8h17=Dc8h17 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.18E+00 3.3 16152.0
2341. c8h16-1=ac3h5+Ac5h11 2.50E+16 0.0 70000.0
2342. c8h16-1=Dc4h7-1+pc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
2343. c8h16-1=Ec5h9-1+nc3h7 1.00E+16 0.0 71000.0
2344. c8h16-1=Fc6h11-1+c2h5 1.00E+16 0.0 71000.0
2345. Cc8h15-1+h=c8h16-1 1.00E+13 0.0 0.0
2346. Dc8h15-2+h=c8h16-2 1.00E+13 0.0 0.0
2347. Ec8h15-3+h=c8h16-3 1.00E+13 0.0 0.0
2348. Ec8h15-3+h=c8h16-4 1.00E+13 0.0 0.0
2349. c8h16-1+ho2=>oh+ch2o+c7h14-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2350. c8h16-2+ho2=>oh+ch3hco+c6h12-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2351. c8h16-2+ho2=>oh+c2h4+c5h11hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2352. c8h16-3+ho2=>oh+ethco+c5h10 2.50E+12 1.0 25000.0
2353. c8h16-3+ho2=>oh+c3h6+nc4h9hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2354. c8h16-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c4h8 5.00E+12 1.0 25000.0
2355. c8h16-1+ch3=Ac6h13+c3h6 9.60E+10 0.0 8000.0
2356. c8h16-1+oh=ch2o+Ac7h15 1.40E+12 0.0 -900.0
2357. c8h16-1+oh=ch3+c6h13hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2358. c8h16-2+oh=ch3hco+Ac6h13 1.40E+12 0.0 -900.0
2359. c8h16-2+oh=c2h5+c5h11hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2360. c8h16-3+oh=ethco+Ac5h11 1.40E+12 0.0 -900.0
2361. c8h16-3+oh=nc3h7+nc4h9hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2362. c8h16-4+oh=nc3h7hco+pc4h9 2.80E+12 0.0 -900.0
2363. c8h16-1+o=ch2o+c7h14-1 1.00E+11 0.0 -1050.0
2364. c8h16-2+o=ch3hco+c6h12-1 1.00E+11 0.0 -1050.0
2365. c8h16-2+o=c2h4+c5h11hco 1.00E+11 0.0 -1050.0
2366. c8h16-3+o=ethco+c5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
2367. c8h16-3+o=c3h6+nc4h9hco 1.00E+11 0.0 -1050.0
2368. c8h16-4+o=nc3h7hco+c4h8 2.00E+11 0.0 -1050.0
2369. c8h16-1+h=h2+Cc8h15-1 5.40E+04 2.5 -1900.0
2370. c8h16-1+oh=h2o+Cc8h15-1 3.00E+06 2.0 -1520.0
2371. c8h16-1+ho2=h2o2+Cc8h15-1 6.40E+03 2.6 12400.0
2372. c8h16-1+ch3=ch4+Cc8h15-1 1.00E+11 0.0 7300.0
2373. c8h16-1+ch3o2=ch3o2h+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2374. c8h16-1+c2h5=c2h6+Cc8h15-1 1.00E+11 0.0 8300.0
2375. c8h16-1+o=oh+Cc8h15-1 4.00E+13 0.0 4000.0
2376. c8h16-1+nc3h7=c3h8+Cc8h15-1 1.00E+11 0.0 8300.0
2377. c8h16-1+c2h3=c2h4+Cc8h15-1 2.00E+11 0.0 6800.0
2378. c8h16-2+h=h2+Cc8h15-1 1.70E+05 2.5 2490.0
2379. c8h16-2+oh=h2o+Cc8h15-1 3.10E+06 2.0 -300.0
2380. c8h16-2+ho2=h2o2+Cc8h15-1 1.02E+04 2.5 12340.5
2381. c8h16-2+ch3=ch4+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2382. c8h16-2+ch3o2=ch3o2h+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2383. c8h16-2+c2h5=c2h6+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 6835.0
2384. c8h16-2+o=oh+Cc8h15-1 6.00E+10 0.7 7682.0
2385. c8h16-2+h=h2+Dc8h15-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2386. c8h16-2+oh=h2o+Dc8h15-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2387. c8h16-2+ho2=h2o2+Dc8h15-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2388. c8h16-2+ch3=ch4+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2389. c8h16-2+ch3o2=ch3o2h+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2390. c8h16-2+c2h5=c2h6+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 6835.0
2391. c8h16-2+o=oh+Dc8h15-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2392. c8h16-3+h=h2+Dc8h15-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2393. c8h16-3+oh=h2o+Dc8h15-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2394. c8h16-3+ho2=h2o2+Dc8h15-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2395. c8h16-3+ch3=ch4+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2396. c8h16-3+ch3o2=ch3o2h+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2397. c8h16-3+c2h5=c2h6+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 6835.0
2398. c8h16-3+o=oh+Dc8h15-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2399. c8h16-3+h=h2+Ec8h15-3 1.70E+05 2.5 2490.0
2400. c8h16-3+oh=h2o+Ec8h15-3 3.10E+06 2.0 -300.0
2401. c8h16-3+ho2=h2o2+Ec8h15-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2402. c8h16-3+ch3=ch4+Ec8h15-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2403. c8h16-3+ch3o2=ch3o2h+Ec8h15-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2404. c8h16-3+c2h5=c2h6+Ec8h15-3 2.20E+00 3.5 6835.0
2405. c8h16-3+o=oh+Ec8h15-3 6.00E+10 0.7 7682.0

2406. c8h16-4+h=h2+Ec8h15-3 3.40E+05 2.5 2490.0
2407. c8h16-4+oh=h2o+Ec8h15-3 6.20E+06 2.0 -300.0
2408. c8h16-4+ho2=h2o2+Ec8h15-3 1.34E+04 2.5 10115.0
2409. c8h16-4+ch3=ch4+Ec8h15-3 4.40E+00 3.5 5675.0
2410. c8h16-4+ch3o2=ch3o2h+Ec8h15-3 4.40E+00 3.5 5675.0
2411. c8h16-4+c2h5=c2h6+Ec8h15-3 4.40E+00 3.5 6835.0
2412. c8h16-4+o=oh+Ec8h15-3 1.20E+11 0.7 7682.0
2413. Cc8h15-1=c4h6+pc4h9 1.34E+15 -0.5 38320.0
2414. Cc8h15-1+ho2=>oh+acrol+Ac5h11 1.00E+12 0.0 8000.0
2415. Dc8h15-2=c5h8-13+nc3h7 2.50E+13 0.0 35000.0
2416. Ec8h15-3=c6h10-13+c2h5 2.50E+13 0.0 35000.0
2417. c8h16-1+oh=c8h16rohAB 2.76E+12 0.0 -1042.0
2418. c8h16rohAB+o2=c8h16qjohAB 1.00E+12 0.0 -1100.0
2419. c8h16qjohAB=>oh+ch2o+c6h13hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2420. c8h16-2+oh=c8h16rohBC 2.76E+12 0.0 -1042.0
2421. c8h16rohBC+o2=c8h16qjohBC 1.00E+12 0.0 -1100.0
2422. c8h16qjohBC=>oh+ch3hco+c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2423. c8h16-3+oh=c8h16rohCD 2.76E+12 0.0 -1042.0
2424. c8h16rohCD+o2=c8h16qjohCD 1.00E+12 0.0 -1100.0
2425. c8h16qjohCD=>oh+ethco+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2426. c8h16-4+oh=c8h16rohDE 2.76E+12 0.0 -1042.0
2427. c8h16rohDE+o2=c8h16qjohDE 1.00E+12 0.0 -1100.0
2428. c8h16qjohDE=>oh+nc3h7hco+nc3h7hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2429. ac3h5+Ec5h9-1=c8h14 1.00E+13 0.0 0.0
2430. Dc4h7-1+Dc4h7-1=c8h14 1.00E+13 0.0 0.0
2431. c7h15hco+h=h2+c7h15co 4.00E+13 0.0 4200.0
2432. c7h15hco+oh=h2o+c7h15co 4.20E+12 0.0 500.0
2433. c7h15hco+ho2=h2o2+c7h15co 1.00E+12 0.0 10000.0
2434. c7h15hco+ch3=ch4+c7h15co 2.00E-06 5.6 2500.0
2435. c7h15hco+c2h5=c2h6+c7h15co 1.30E+12 0.0 8500.0
2436. c7h15co+M=co+Ac7h15+M 8.64E+15 0.0 14400.0
2437. c7h15co+ho2=>co2+oh+Ac7h15 2.00E+13 0.0 0.0
2438. Hc8h15-1=Fc6h11-1+c2h4 2.00E+13 0.0 29400.0
2439. nc9h20=pc4h9+Ac5h11 2.00E+17 0.0 83180.0
2440. nc9h20=nc3h7+Ac6h13 2.00E+17 0.0 83400.0
2441. nc9h20=c2h5+Ac7h15 2.00E+17 0.0 83680.0
2442. nc9h20=ch3+Ac8h17 2.00E+17 0.0 85570.0
2443. nc9h20+h=Ac9h19 9.61E+14 0.5 97289.0
2444. nc9h20+h=Bc9h19 1.07E+12 1.3 96900.0
2445. nc9h20+h=Cc9h19 1.55E+12 1.2 96992.0
2446. nc9h20+h=Dc9h19 1.55E+12 1.2 96992.0
2447. nc9h20+h=Ec9h19 1.55E+12 1.2 96992.0
2448. nc9h20+o2=ho2+Ac9h19 4.00E+13 0.0 50870.0
2449. nc9h20+o2=ho2+Bc9h19 8.00E+13 0.0 47690.0
2450. nc9h20+o2=ho2+Cc9h19 8.00E+13 0.0 47690.0
2451. nc9h20+o2=ho2+Dc9h19 8.00E+13 0.0 47690.0
2452. nc9h20+o2=ho2+Ec9h19 4.00E+13 0.0 47690.0
2453. nc9h20+oh=h2o+Ac9h19 1.05E+10 1.0 1590.0
2454. nc9h20+oh=h2o+Bc9h19 9.36E+07 1.6 -35.0
2455. nc9h20+oh=h2o+Cc9h19 9.36E+07 1.6 -35.0
2456. nc9h20+oh=h2o+Dc9h19 9.36E+07 1.6 -35.0
2457. nc9h20+oh=h2o+Ec9h19 4.68E+07 1.6 -35.0
2458. nc9h20+ho2=h2o2+Ac9h19 3.60E+04 2.5 16683.0
2459. nc9h20+ho2=h2o2+Bc9h19 4.00E+04 2.5 14208.0
2460. nc9h20+ho2=h2o2+Cc9h19 4.00E+04 2.5 14208.0
2461. nc9h20+ho2=h2o2+Dc9h19 4.00E+04 2.5 14208.0
2462. nc9h20+ho2=h2o2+Ec9h19 2.00E+04 2.5 14208.0

2463. nc9h20+h=h2+Ac9h19 5.70E+07 2.0 7700.0
2464. nc9h20+h=h2+Bc9h19 1.80E+07 2.0 5000.0
2465. nc9h20+h=h2+Cc9h19 1.80E+07 2.0 5000.0
2466. nc9h20+h=h2+Dc9h19 1.80E+07 2.0 5000.0
2467. nc9h20+h=h2+Ec9h19 9.00E+06 2.0 5000.0
2468. o+nc9h20=oh+Ac9h19 1.00E+14 0.0 7850.0
2469. o+nc9h20=oh+Bc9h19 5.20E+13 0.0 5200.0
2470. o+nc9h20=oh+Cc9h19 5.20E+13 0.0 5200.0
2471. o+nc9h20=oh+Dc9h19 5.20E+13 0.0 5200.0
2472. o+nc9h20=oh+Ec9h19 2.60E+13 0.0 5200.0
2473. nc9h20+ch3=ch4+Ac9h19 6.00E-01 4.0 8200.0
2474. nc9h20+ch3=ch4+Bc9h19 4.00E+11 0.0 9600.0
2475. nc9h20+ch3=ch4+Cc9h19 4.00E+11 0.0 9600.0
2476. nc9h20+ch3=ch4+Dc9h19 4.00E+11 0.0 9600.0
2477. nc9h20+ch3=ch4+Ec9h19 2.00E+11 0.0 9600.0
2478. nc9h20+c2h5=c2h6+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13500.0
2479. nc9h20+c2h5=c2h6+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11000.0
2480. nc9h20+c2h5=c2h6+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11000.0
2481. nc9h20+c2h5=c2h6+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11000.0
2482. nc9h20+c2h5=c2h6+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11000.0
2483. nc9h20+hco=ch2o+Ac9h19 2.00E+05 2.5 18500.0
2484. nc9h20+hco=ch2o+Bc9h19 2.20E+07 1.9 17000.0
2485. nc9h20+hco=ch2o+Cc9h19 2.20E+07 1.9 17000.0
2486. nc9h20+hco=ch2o+Dc9h19 2.20E+07 1.9 17000.0
2487. nc9h20+hco=ch2o+Ec9h19 1.10E+07 1.9 17000.0
2488. nc9h20+ch3o=ch3oh+Ac9h19 3.20E+11 0.0 7300.0
2489. nc9h20+ch3o=ch3oh+Bc9h19 2.90E+11 0.0 4500.0
2490. nc9h20+ch3o=ch3oh+Cc9h19 2.90E+11 0.0 4500.0
2491. nc9h20+ch3o=ch3oh+Dc9h19 2.90E+11 0.0 4500.0
2492. nc9h20+ch3o=ch3oh+Ec9h19 1.45E+11 0.0 4500.0
2493. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Ac9h19 2.00E+02 3.0 14000.0
2494. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Bc9h19 1.20E+02 3.0 12000.0
2495. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Cc9h19 1.20E+02 3.0 12000.0
2496. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Dc9h19 1.20E+02 3.0 12000.0
2497. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Ec9h19 6.00E+01 3.0 12000.0
2498. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Ac9h19 1.20E+13 0.0 20000.0
2499. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Bc9h19 6.00E+12 0.0 17500.0
2500. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Cc9h19 6.00E+12 0.0 17500.0
2501. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Dc9h19 6.00E+12 0.0 17500.0
2502. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Ec9h19 3.00E+12 0.0 17500.0
2503. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
2504. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2505. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2506. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2507. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2508. nc9h20+ch3co=ch3hco+Ac9h19 3.00E+11 0.0 15000.0
2509. nc9h20+ch3co=ch3hco+Bc9h19 2.00E+11 0.0 12700.0
2510. nc9h20+ch3co=ch3hco+Cc9h19 2.00E+11 0.0 12700.0
2511. nc9h20+ch3co=ch3hco+Dc9h19 2.00E+11 0.0 12700.0
2512. nc9h20+ch3co=ch3hco+Ec9h19 1.00E+11 0.0 12700.0
2513. nc9h20+nc3h7=c3h8+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
2514. nc9h20+nc3h7=c3h8+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2515. nc9h20+nc3h7=c3h8+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2516. nc9h20+nc3h7=c3h8+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2517. nc9h20+nc3h7=c3h8+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2518. nc9h20+pc4h9=c4h10+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
2519. nc9h20+pc4h9=c4h10+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0

2520. nc9h20+pc4h9=c4h10+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2521. nc9h20+pc4h9=c4h10+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2522. nc9h20+pc4h9=c4h10+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2523. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
2524. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2525. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2526. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2527. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2528. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
2529. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2530. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2531. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2532. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2533. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
2534. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2535. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2536. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2537. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2538. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
2539. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2540. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2541. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2542. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2543. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2544. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2545. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
2546. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
2547. nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Cc9h19 4.00E+11 0.0 12400.0
2548. nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Dc9h19 4.00E+11 0.0 12400.0
2549. nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 12400.0
2550. nc9h20+Cc9h19=nc9h20+Dc9h19 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2551. nc9h20+Cc9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2552. nc9h20+Dc9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2553. Ac9h19=Ac7h15+c2h4 9.12E+11 0.3 27240.5
2554. Bc9h19=Ac6h13+c3h6 6.02E+10 0.8 27822.8
2555. Cc9h19=Ac5h11+c4h8 2.04E+13 0.0 28496.5
2556. Cc9h19=ch3+c8h16-1 9.55E+09 1.1 29390.7
2557. Dc9h19=pc4h9+c5h10 2.04E+13 0.0 28496.5
2558. Dc9h19=c2h5+c7h14-1 8.51E+09 1.1 27025.9
2559. Ec9h19=nc3h7+c6h12-1 5.50E+11 0.6 28087.1
2560. Ac9h19=h+c9h18-1 1.28E+12 0.2 38372.0
2561. Bc9h19=h+c9h18-1 1.95E+15 -0.6 37371.0
2562. Bc9h19=h+c9h18-2 2.74E+15 -0.7 36120.0
2563. Cc9h19=h+c9h18-2 1.90E+15 -0.7 36028.0
2564. Cc9h19=h+c9h18-3 1.08E+15 -0.7 35875.0
2565. Dc9h19=h+c9h18-3 1.08E+15 -0.7 35875.0
2566. Dc9h19=h+c9h18-4 1.08E+15 -0.7 35875.0
2567. Ec9h19=h+c9h18-4 2.11E+15 -0.6 35872.0
2568. Ac9h19+o2=c9h18-1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2569. Bc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2570. Bc9h19+o2=c9h18-1+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2571. Cc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2572. Cc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2573. Dc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0

2574. Dc9h19+o2=c9h18-4+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2575. Ec9h19+o2=c9h18-4+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
2576. Ac9h19=Dc9h19 6.38E-04 4.3 9944.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.08E-03 4.1 12085.0
2577. Ac9h19=Ec9h19 2.29E+01 2.8 10757.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.72E+00 3.2 12849.0
2578. Bc9h19=Cc9h19 2.95E+00 3.1 11017.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.95E+00 3.1 11017.0
2579. Bc9h19=Dc9h19 1.86E+00 3.3 13199.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.86E+00 3.3 13199.0
2580. Bc9h19=Ec9h19 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.82E+00 3.3 16146.0
2581. Cc9h19=Dc9h19 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.41E+00 3.3 16146.0
2582. c9h18-1+ch3=Ac7h15+c3h6 9.60E+10 0.0 8000.0
2583. c9h18-1+oh=ch3+c7h15hco 1.00E+12 0.0 0.0
2584. c9h18-1+oh=ch2o+Ac8h17 1.00E+12 0.0 0.0
2585. c9h18-2+oh=c2h5+c6h13hco 1.00E+12 0.0 0.0
2586. c9h18-2+oh=ch3hco+Ac7h15 1.00E+12 0.0 0.0
2587. c9h18-3+oh=nc3h7+c5h11hco 1.00E+12 0.0 0.0
2588. c9h18-3+oh=ethco+Ac6h13 1.00E+12 0.0 0.0
2589. c9h18-4+oh=pc4h9+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 0.0
2590. c9h18-4+oh=nc3h7hco+Ac5h11 1.00E+12 0.0 0.0
2591. c9h18-1+o=ch2o+c8h16-1 3.40E+07 1.8 550.0
2592. c9h18-2+o=ch3hco+c7h14-1 3.40E+07 1.8 550.0
2593. c9h18-2+o=c2h4+c6h13hco 3.40E+07 1.8 550.0
2594. c9h18-3+o=ethco+c6h12-1 3.40E+07 1.8 550.0
2595. c9h18-3+o=c3h6+c5h11hco 3.40E+07 1.8 550.0
2596. c9h18-4+o=nc3h7hco+c5h10 3.40E+07 1.8 550.0
2597. c9h18-4+o=c4h8+nc4h9hco 3.40E+07 1.8 550.0
2598. c9h18-1+h=h2+Cc9h17-1 1.70E+05 2.5 2490.0
2599. c9h18-1+oh=h2o+Cc9h17-1 3.10E+06 2.0 -300.0
2600. c9h18-1+ho2=h2o2+Cc9h17-1 6.80E+03 2.5 10115.0
2601. c9h18-1+ch3=ch4+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2602. c9h18-1+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2603. c9h18-1+c2h5=c2h6+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 6835.0
2604. c9h18-1+o=oh+Cc9h17-1 6.00E+10 0.7 7682.0
2605. c9h18-2+h=h2+Cc9h17-1 1.70E+05 2.5 2490.0
2606. c9h18-2+oh=h2o+Cc9h17-1 3.10E+06 2.0 -300.0
2607. c9h18-2+ho2=h2o2+Cc9h17-1 1.02E+04 2.5 12340.5
2608. c9h18-2+ch3=ch4+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2609. c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2610. c9h18-2+c2h5=c2h6+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 6835.0
2611. c9h18-2+o=oh+Cc9h17-1 6.00E+10 0.7 7682.0
2612. c9h18-2+h=h2+Dc9h17-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2613. c9h18-2+oh=h2o+Dc9h17-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2614. c9h18-2+ho2=h2o2+Dc9h17-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2615. c9h18-2+ch3=ch4+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2616. c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2617. c9h18-2+c2h5=c2h6+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 6835.0
2618. c9h18-2+o=oh+Dc9h17-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2619. c9h18-3+h=h2+Dc9h17-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2620. c9h18-3+oh=h2o+Dc9h17-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2621. c9h18-3+ho2=h2o2+Dc9h17-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2622. c9h18-3+ch3=ch4+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2623. c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2624. c9h18-3+c2h5=c2h6+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 6835.0

2625. c9h18-3+o=oh+Dc9h17-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2626. c9h18-3+h=h2+Ec9h17-3 1.70E+05 2.5 2490.0
2627. c9h18-3+oh=h2o+Ec9h17-3 3.10E+06 2.0 -300.0
2628. c9h18-3+ho2=h2o2+Ec9h17-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2629. c9h18-3+ch3=ch4+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2630. c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2631. c9h18-3+c2h5=c2h6+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 6835.0
2632. c9h18-3+o=oh+Ec9h17-3 6.00E+10 0.7 7682.0
2633. c9h18-4+h=h2+Ec9h17-3 1.70E+05 2.5 2490.0
2634. c9h18-4+oh=h2o+Ec9h17-3 3.10E+06 2.0 -300.0
2635. c9h18-4+ho2=h2o2+Ec9h17-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2636. c9h18-4+ch3=ch4+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2637. c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2638. c9h18-4+c2h5=c2h6+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 6835.0
2639. c9h18-4+o=oh+Ec9h17-3 6.00E+10 0.7 7682.0
2640. c9h18-4+h=h2+Fc9h17-4 1.70E+05 2.5 2490.0
2641. c9h18-4+oh=h2o+Fc9h17-4 3.10E+06 2.0 -300.0
2642. c9h18-4+ho2=h2o2+Fc9h17-4 6.80E+03 2.5 10115.0
2643. c9h18-4+ch3=ch4+Fc9h17-4 2.20E+00 3.5 5675.0
2644. c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Fc9h17-4 2.20E+00 3.5 5675.0
2645. c9h18-4+c2h5=c2h6+Fc9h17-4 2.20E+00 3.5 6835.0
2646. c9h18-4+o=oh+Fc9h17-4 6.00E+10 0.7 7682.0
2647. Cc9h17-1=c4h6+Ac5h11 2.50E+13 0.0 35000.0
2648. Cc9h17-1+h=c9h18-1 1.00E+13 0.0 0.0
2649. Cc9h17-1+ho2=oh+acrol+Ac6h13 1.00E+12 0.0 8000.0
2650. Dc9h17-2=c5h8-13+pc4h9 2.50E+13 0.0 35000.0
2651. Ec9h17-3=c6h10-13+nc3h7 2.50E+13 0.0 35000.0
2652. Fc9h17-4=c7h12-13+c2h5 2.50E+13 0.0 35000.0
2653. Dc4h7-1+Ec5h9-1=c9h16 1.00E+13 0.0 0.0
2654. c8h17hco+h=h2+c8h17co 4.00E+13 0.0 4200.0
2655. c8h17hco+oh=h2o+c8h17co 4.20E+12 0.0 500.0
2656. c8h17hco+ho2=h2o2+c8h17co 1.00E+12 0.0 10000.0
2657. c8h17hco+ch3=ch4+c8h17co 2.00E-06 5.6 2500.0
2658. c8h17hco+c2h5=c2h6+c8h17co 1.30E+12 0.0 8500.0
2659. c8h17co=>co+Ac8h17 2.00E+13 0.0 28700.0
2660. c8h17co+ho2=>co2+oh+Ac8h17 2.00E+13 0.0 0.0
2661. nc10h22=Ac5h11+Ac5h11 2.00E+17 0.0 83180.0
2662. nc10h22=pc4h9+Ac6h13 2.00E+17 0.0 83180.0
2663. nc10h22=nc3h7+Ac7h15 2.00E+17 0.0 83400.0
2664. nc10h22=c2h5+Ac8h17 2.00E+17 0.0 83680.0
2665. nc10h22=ch3+Ac9h19 2.00E+17 0.0 85570.0
2666. nc10h22=h+Ac10h21 1.10E+14 0.8 96940.0
2667. nc10h22=h+Bc10h21 3.41E+15 0.3 97203.0
2668. nc10h22=h+Cc10h21 3.75E+15 0.3 97191.0
2669. nc10h22=h+Dc10h21 3.75E+15 0.3 97191.0
2670. nc10h22=h+Ec10h21 3.75E+15 0.3 97191.0
2671. nc10h22+o2=ho2+Ac10h21 4.00E+13 0.0 50870.0
2672. nc10h22+o2=ho2+Bc10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
2673. nc10h22+o2=ho2+Cc10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
2674. nc10h22+o2=ho2+Dc10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
2675. nc10h22+o2=ho2+Bc10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
2676. nc10h22+oh=h2o+Ac10h21 1.05E+10 1.0 1590.0
2677. nc10h22+oh=h2o+Bc10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
2678. nc10h22+oh=h2o+Cc10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
2679. nc10h22+oh=h2o+Dc10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
2680. nc10h22+oh=h2o+Bc10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
2681. nc10h22+ho2=h2o2+Ac10h21 3.60E+04 2.5 16683.0
2682. nc10h22+ho2=h2o2+Bc10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
2683. nc10h22+ho2=h2o2+Cc10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
2684. nc10h22+ho2=h2o2+Dc10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
2685. nc10h22+ho2=h2o2+Ec10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
2686. nc10h22+h=h2+Ac10h21 5.70E+07 2.0 7700.0
2687. nc10h22+h=h2+Bc10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
2688. nc10h22+h=h2+Cc10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
2689. nc10h22+h=h2+Dc10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
2690. nc10h22+h=h2+Ec10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
2691. o+nc10h22=oh+Ac10h21 1.00E+14 0.0 7850.0
2692. o+nc10h22=oh+Bc10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
2693. o+nc10h22=oh+Cc10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
2694. o+nc10h22=oh+Dc10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
2695. o+nc10h22=oh+Ec10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
2696. nc10h22+ch3=ch4+Ac10h21 6.00E-01 4.0 8200.0
2697. nc10h22+ch3=ch4+Bc10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
2698. nc10h22+ch3=ch4+Cc10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
2699. nc10h22+ch3=ch4+Dc10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
2700. nc10h22+ch3=ch4+Ec10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
2701. nc10h22+c2h5=c2h6+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13500.0
2702. nc10h22+c2h5=c2h6+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
2703. nc10h22+c2h5=c2h6+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
2704. nc10h22+c2h5=c2h6+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
2705. nc10h22+c2h5=c2h6+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
2706. nc10h22+hco=ch2o+Ac10h21 2.00E+05 2.5 18500.0
2707. nc10h22+hco=ch2o+Bc10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
2708. nc10h22+hco=ch2o+Cc10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
2709. nc10h22+hco=ch2o+Dc10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
2710. nc10h22+hco=ch2o+Ec10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
2711. nc10h22+ch3o=ch3oh+Ac10h21 3.20E+11 0.0 7300.0
2712. nc10h22+ch3o=ch3oh+Bc10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
2713. nc10h22+ch3o=ch3oh+Cc10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
2714. nc10h22+ch3o=ch3oh+Dc10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
2715. nc10h22+ch3o=ch3oh+Ec10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
2716. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ac10h21 2.00E+02 3.0 14000.0
2717. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Bc10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
2718. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Cc10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
2719. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Dc10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
2720. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ec10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
2721. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
2722. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
2723. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
2724. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
2725. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
2726. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2727. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2728. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2729. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2730. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2731. nc10h22+ch3co=ch3hco+Ac10h21 3.00E+11 0.0 15000.0
2732. nc10h22+ch3co=ch3hco+Bc10h21 2.00E+11 0.0 12700.0
2733. nc10h22+ch3co=ch3hco+Cc10h21 2.00E+11 0.0 12700.0
2734. nc10h22+ch3co=ch3hco+Dc10h21 2.00E+11 0.0 12700.0
2735. nc10h22+ch3co=ch3hco+Ec10h21 2.00E+11 0.0 12700.0
2736. nc10h22+nc3h7=c3h8+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2737. nc10h22+nc3h7=c3h8+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2738. nc10h22+nc3h7=c3h8+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2739. nc10h22+nc3h7=c3h8+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2740. nc10h22+nc3h7=c3h8+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2741. nc10h22+pc4h9=c4h10+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2742. nc10h22+pc4h9=c4h10+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2743. nc10h22+pc4h9=c4h10+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2744. nc10h22+pc4h9=c4h10+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2745. nc10h22+pc4h9=c4h10+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2746. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2747. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2748. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2749. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2750. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2751. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2752. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2753. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2754. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2755. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2756. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2757. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2758. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2759. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2760. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2761. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2762. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2763. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2764. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2765. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2766. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2767. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2768. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2769. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2770. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2771. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2772. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2773. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2774. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2775. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2776. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2777. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2778. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2779. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2780. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2781. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2782. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2783. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2784. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2785. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2786. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2787. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2788. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2789. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2790. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2791. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2792. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2793. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2794. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2795. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2796. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2797. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2798. nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2799. nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2800. nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2801. Ac10h21=Ac8h17+c2h4 9.12E+11 0.3 27240.5
2802. Bc10h21=Ac7h15+c3h6 6.02E+10 0.8 27822.8
2803. Cc10h21=Ac6h13+c4h8 2.04E+13 0.0 28496.5
2804. Cc10h21=ch3+c9h18-1 9.55E+09 1.1 29390.7
2805. Dc10h21=Ac5h11+c5h10 2.04E+13 0.0 28496.5
2806. Dc10h21=c2h5+c8h16-1 8.51E+09 1.1 27025.9
2807. Ec10h21=pc4h9+c6h12-1 2.04E+13 0.0 28496.5
2808. Ec10h21=nc3h7+c7h14-1 5.50E+11 0.6 28087.1
2809. Ac10h21=h+c10h20-1 1.99E+13 0.0 35861.0
2810. Bc10h21=h+c10h20-1 7.73E+12 0.2 36548.0
2811. Bc10h21=h+c10h20-2 1.08E+13 0.0 35288.0
2812. Cc10h21=h+c10h20-2 7.47E+12 0.0 35206.0
2813. Cc10h21=h+c10h20-3 4.03E+12 0.1 35036.0
2814. Dc10h21=h+c10h20-3 4.03E+12 0.1 35039.0
2815. Dc10h21=h+c10h20-4 4.02E+12 0.1 35037.0
2816. Ec10h21=h+c10h20-4 4.02E+12 0.1 35037.0
2817. Ec10h21=h+c10h20-5 2.19E+12 0.1 35055.0
2818. Ac10h21+o2=c10h20-1+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2819. Bc10h21+o2=c10h20-1+ho2 6.90E+11 0.0 5000.0
2820. Bc10h21+o2=c10h20-2+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2821. Cc10h21+o2=c10h20-2+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2822. Cc10h21+o2=c10h20-3+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2823. Dc10h21+o2=c10h20-3+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2824. Dc10h21+o2=c10h20-4+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2825. Ec10h21+o2=c10h20-4+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2826. Ec10h21+o2=c10h20-5+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
2827. Ac10h21+o=ch2o+Ac9h19 2.00E+13 0.0 4000.0
2828. Bc10h21+o=ch3hco+Ac8h17 2.00E+13 0.0 4000.0
2829. Bc10h21+o=ch3+c8h17hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2830. Cc10h21+o=ethco+Ac7h15 2.00E+13 0.0 4000.0
2831. Cc10h21+o=c2h5+c7h15hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2832. Dc10h21+o=nc3h7+c6h13hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2833. Dc10h21+o=nc3h7hco+Ac6h13 2.00E+13 0.0 4000.0
2834. Ec10h21+o=pc4h9+c5h11hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2835. Ec10h21+o=nc4h9hco+Ac5h11 2.00E+13 0.0 4000.0
2836. Ac10h21+oh=ch2o+nc9h20 2.00E+13 0.0 4000.0
2837. Bc10h21+oh=ch3hco+nc8h18 2.00E+13 0.0 4000.0
2838. Bc10h21+oh=ch4+c8h17hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2839. Cc10h21+oh=ethco+nc7h16 2.00E+13 0.0 4000.0
2840. Cc10h21+oh=c2h6+c7h15hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2841. Dc10h21+oh=c3h8+c6h13hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2842. Dc10h21+oh=nc3h7hco+c6h14 2.00E+13 0.0 4000.0
2843. Ec10h21+oh=c4h10+c5h11hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2844. Ec10h21+oh=nc4h9hco+nc5h12 2.00E+13 0.0 4000.0
2845. Ac10h21+ho2=ch2o+Ac9h19+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2846. Bc10h21+ho2=ch3hco+Ac8h17+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2847. Bc10h21+ho2=ch3+c8h17hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2848. Cc10h21+ho2=ethco+Ac7h15+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2849. Cc10h21+ho2=c2h5+c7h15hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0

2850. Dc10h21+ho2=nc3h7+c6h13hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2851. Dc10h21+ho2=nc3h7hco+Ac6h13+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2852. Ec10h21+ho2=pc4h9+c5h11hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2853. Ec10h21+ho2=nc4h9hco+Ac5h11+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2854. Ac10h21=Dc10h21 5.13E+00 3.2 16849.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.17E-01 3.6 18942.0
2855. Ac10h21=Ec10h21 1.49E+01 3.0 10792.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.79E+00 3.1 12956.0
2856. Bc10h21=Dc10h21 2.95E+00 3.1 11017.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.95E+00 3.1 11017.0
2857. Bc10h21=Ec10h21 1.40E-01 3.7 12982.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.40E-01 3.7 12982.0
2858. Cc10h21=Dc10h21 1.86E+00 3.3 13199.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.86E+00 3.3 13199.0
2859. Cc10h21=Ec10h21 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.41E+00 3.3 16146.0
2860. c10h20-1=ac3h5+Ac7h15 2.50E+16 0.0 70000.0
2861. c10h20-1=Dc4h7-1+Ac6h13 1.00E+16 0.0 71000.0
2862. c10h20-1=Ec5h9-1+Ac5h11 1.00E+16 0.0 71000.0
2863. c10h20-1=Fc6h11-1+pc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
2864. Cc10h19-1+h=c10h20-1 1.00E+13 0.0 0.0
2865. Dc10h19-2+h=c10h20-2 1.00E+13 0.0 0.0
2866. Ec10h19-3+h=c10h20-3 1.00E+13 0.0 0.0
2867. Fc10h19-4+h=c10h20-4 1.00E+13 0.0 0.0
2868. c10h20-1+ho2=>oh+ch2o+c9h18-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2869. c10h20-2+ho2=>oh+ch3hco+c8h16-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2870. c10h20-2+ho2=>oh+c2h4+c7h15hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2871. c10h20-3+ho2=>oh+ethco+c7h14-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2872. c10h20-3+ho2=>oh+c3h6+c6h13hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2873. c10h20-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c6h12-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2874. c10h20-4+ho2=>oh+c4h8+c5h11hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2875. c10h20-5+ho2=>oh+c5h10+nc4h9hco 5.00E+12 1.0 25000.0
2876. c10h20-1+oh=ch2o+Ac9h19 1.40E+12 0.0 -900.0
2877. c10h20-1+oh=ch3+c8h17hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2878. c10h20-2+oh=ch3hco+Ac8h17 1.40E+12 0.0 -900.0
2879. c10h20-2+oh=c2h5+c7h15hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2880. c10h20-3+oh=ethco+Ac7h15 1.40E+12 0.0 -900.0
2881. c10h20-3+oh=nc3h7+c6h13hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2882. c10h20-4+oh=nc3h7hco+Ac6h13 1.40E+12 0.0 -900.0
2883. c10h20-4+oh=pc4h9+c5h11hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2884. c10h20-5+oh=Ac5h11+nc4h9hco 2.80E+12 0.0 -900.0
2885. c10h20-1+o=ch2o+c9h18-1 3.40E+07 1.8 550.0
2886. c10h20-2+o=ch3hco+c8h16-1 3.40E+07 1.8 550.0
2887. c10h20-2+o=c2h4+c7h15hco 3.40E+07 1.8 550.0
2888. c10h20-3+o=ethco+c7h14-1 3.40E+07 1.8 550.0
2889. c10h20-3+o=c3h6+c6h13hco 3.40E+07 1.8 550.0
2890. c10h20-4+o=nc3h7hco+c6h12-1 3.40E+07 1.8 550.0
2891. c10h20-4+o=c4h8+c5h11hco 3.40E+07 1.8 550.0
2892. c10h20-5+o=c5h10+nc4h9hco 6.80E+07 1.8 550.0
2893. c10h20-1+h=h2+Cc10h19-1 1.70E+05 2.5 2490.0
2894. c10h20-1+oh=h2o+Cc10h19-1 3.10E+06 2.0 -300.0
2895. c10h20-1+ho2=h2o2+Cc10h19-1 6.80E+03 2.5 10115.0
2896. c10h20-1+ch3=ch4+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2897. c10h20-1+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2898. c10h20-1+c2h5=c2h6+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 6835.0
2899. c10h20-1+o=oh+Cc10h19-1 6.00E+10 0.7 7682.0
2900. c10h20-2+h=h2+Cc10h19-1 1.70E+05 2.5 2490.0

2901. c10h20-2+oh=h2o+Cc10h19-1 3.10E+06 2.0 -300.0
2902. c10h20-2+ho2=h2o2+Cc10h19-1 1.02E+04 2.5 12340.5
2903. c10h20-2+ch3=ch4+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2904. c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2905. c10h20-2+c2h5=c2h6+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 6835.0
2906. c10h20-2+o=oh+Cc10h19-1 6.00E+10 0.7 7682.0
2907. c10h20-2+h=h2+Dc10h19-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2908. c10h20-2+oh=h2o+Dc10h19-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2909. c10h20-2+ho2=h2o2+Dc10h19-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2910. c10h20-2+ch3=ch4+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2911. c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2912. c10h20-2+c2h5=c2h6+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 6835.0
2913. c10h20-2+o=oh+Dc10h19-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2914. c10h20-3+h=h2+Dc10h19-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2915. c10h20-3+oh=h2o+Dc10h19-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2916. c10h20-3+ho2=h2o2+Dc10h19-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2917. c10h20-3+ch3=ch4+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2918. c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2919. c10h20-3+c2h5=c2h6+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 6835.0
2920. c10h20-3+o=oh+Dc10h19-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2921. c10h20-3+h=h2+Ec10h19-3 1.70E+05 2.5 2490.0
2922. c10h20-3+oh=h2o+Ec10h19-3 3.10E+06 2.0 -300.0
2923. c10h20-3+ho2=h2o2+Ec10h19-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2924. c10h20-3+ch3=ch4+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2925. c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2926. c10h20-3+c2h5=c2h6+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 6835.0
2927. c10h20-3+o=oh+Ec10h19-3 6.00E+10 0.7 7682.0
2928. c10h20-4+h=h2+Ec10h19-3 1.70E+05 2.5 2490.0
2929. c10h20-4+oh=h2o+Ec10h19-3 3.10E+06 2.0 -300.0
2930. c10h20-4+ho2=h2o2+Ec10h19-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2931. c10h20-4+ch3=ch4+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2932. c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2933. c10h20-4+c2h5=c2h6+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 6835.0
2934. c10h20-4+o=oh+Ec10h19-3 6.00E+10 0.7 7682.0
2935. c10h20-4+h=h2+Fc10h19-4 1.70E+05 2.5 2490.0
2936. c10h20-4+oh=h2o+Fc10h19-4 3.10E+06 2.0 -300.0
2937. c10h20-4+ho2=h2o2+Fc10h19-4 6.80E+03 2.5 10115.0
2938. c10h20-4+ch3=ch4+Fc10h19-4 2.20E+00 3.5 5675.0
2939. c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4 2.20E+00 3.5 5675.0
2940. c10h20-4+c2h5=c2h6+Fc10h19-4 2.20E+00 3.5 6835.0
2941. c10h20-4+o=oh+Fc10h19-4 6.00E+10 0.7 7682.0
2942. c10h20-5+h=h2+Fc10h19-4 3.40E+05 2.5 2490.0
2943. c10h20-5+oh=h2o+Fc10h19-4 6.20E+06 2.0 -300.0
2944. c10h20-5+ho2=h2o2+Fc10h19-4 6.80E+03 2.5 10115.0
2945. c10h20-5+ch3=ch4+Fc10h19-4 4.40E+00 3.5 5675.0
2946. c10h20-5+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4 4.40E+00 3.5 5675.0
2947. c10h20-5+c2h5=c2h6+Fc10h19-4 4.40E+00 3.5 6835.0
2948. c10h20-5+o=oh+Fc10h19-4 1.20E+11 0.7 7682.0
2949. c10h20-1+oh=c10h20rohAB 2.76E+12 0.0 -1042.0
2950. c10h20rohAB+o2=c10h20qjohAB 1.00E+12 0.0 -1100.0
2951. c10h20qjohAB=>oh+ch2o+c8h17hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2952. c10h20-2+oh=c10h20rohBC 2.76E+12 0.0 -1042.0
2953. c10h20rohBC+o2=c10h20qjohBC 1.00E+12 0.0 -1100.0
2954. c10h20qjohBC=>oh+ch3hco+c7h15hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2955. c10h20-3+oh=c10h20rohCD 2.76E+12 0.0 -1042.0
2956. c10h20rohCD+o2=c10h20qjohCD 1.00E+12 0.0 -1100.0
2957. c10h20qjohCD=>oh+ethco+c6h13hco 1.00E+12 0.0 28680.0

2958. c10h20-4+oh=c10h20rohDE 2.76E+12 0.0 -1042.0
2959. c10h20rohDE+o2=c10h20qjohDE 1.00E+12 0.0 -1100.0
2960. c10h20qjohDE=>oh+nc3h7hco+c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2961. c10h20-5+oh=c10h20rohEF 2.76E+12 0.0 -1042.0
2962. c10h20rohEF+o2=c10h20qjohEF 1.00E+12 0.0 -1100.0
2963. c10h20qjohEF=>oh+nc4h9hco+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2964. Cc10h19-1=c4h6+Ac6h13 1.34E+15 -0.5 38320.0
2965. Dc10h19-2=c5h8-13+Ac5h11 2.50E+13 0.0 35000.0
2966. Ec10h19-3=c6h10-13+pc4h9 2.50E+13 0.0 35000.0
2967. Fc10h19-4=c7h12-13+nc3h7 2.50E+13 0.0 35000.0
2968. c4h6+c2h3=chd13+h 7.00E+11 0.0 1650.0
2969. cyc6h9+ho2=chd13+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
2970. cyc6h9+oh=chd13+h2o 1.80E+13 0.0 0.0
2971. cyc6h9+o2=ho2+chd13 9.60E+12 0.0 15160.0
2972. cyc6h9=h+chd13 3.00E+13 0.0 50500.0
2973. cyc6h9+o=chd13+oh 1.80E+13 0.0 0.0
2974. cyc6h9+h=chd13+h2 3.16E+13 0.0 0.0
2975. cyc6h9+ch3=chd13+ch4 8.00E+12 0.0 0.0
2976. cyc6h9+c2h3=chd13+c2h4 4.00E+12 0.0 0.0
2977. cyc6h9+c2h5=chd13+c2h6 4.00E+12 0.0 0.0
2978. cyc6h9+ac3h5=chd13+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2979. cyc6h9+sc3h5=chd13+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2980. cyc6h9+tc3h5=chd13+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2981. cyc6h9+hco=chd13+ch2o 4.00E+12 0.0 0.0
2982. cyc6h9+ch3o=chd13+ch3oh 4.00E+12 0.0 0.0
2983. cyc6h9+ho2=cyc6h9o+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
2984. cyc6h9+o=cyc5h8+hco 8.26E+13 0.0 0.0
2985. cyc6h9+o2=chxe1qjC 2.43E+39 -9.0 8620.0
2986. chxe1qjC=Echxe1qC 2.14E+09 1.0 28226.6
2987. Echxe1qC+o2=chxe1qCqjE 1.84E+45 -11.1 6538.0
2988. chxe1qCqjE=chxe1oCqE+oh 1.07E+09 1.0 26226.6
2989. oh+chxe1oCojE=chxe1oCqE 1.81E+13 0.0 0.0
2990. Dc6e5oAoC=chxe1oCojE 1.00E+08 0.9 5900.0
2991. Fc6e3oAoE=chxe1oCojE 1.00E+08 0.9 5900.0
2992. Dc6e5oAoC+o=acrol+hcoch2co 2.00E+14 0.0 0.0
2993. Dc6e5oAoC+ho2=oh+acrol+hcoch2co 1.00E+13 0.0 0.0
2994. ch2co+ac3h4hcol=Fc6e3oAoE 2.00E+11 0.0 2010.0
2995. chxe1rD=cyc6h9 1.30E+13 0.0 44500.0
2996. chxe1rD=Ac6h9-15 2.00E+13 0.0 35500.0
2997. chxe1rD+o2=ho2+chd13 9.60E+12 0.0 2500.0
2998. chxe1rD=h+chd13 3.20E+13 0.0 34500.0
2999. chxe1rD+o2=ho2+chd14 9.60E+12 0.0 5000.0
3000. chxe1rD=h+chd14 3.00E+13 0.0 33800.0
3001. Fc6e5oA=cyc6h9o 1.00E+08 0.9 5900.0
3002. c2h2+c3h6cho-1=Fc6e5oA 7.77E+06 1.4 7755.0
3003. Fc6e2oA=cyc6h9o 1.00E+08 0.9 5900.0
3004. c2h4+sc3h5co=Fc6e2oA 1.32E+04 2.5 6130.0
3005. Fc6h9-13+o2=hex135+ho2 2.70E+11 0.0 2500.0
3006. Fc6h9-13=hex135+h 3.20E+13 0.0 34800.0
3007. Fc6h9-13=nc4h5+c2h4 2.00E+13 0.0 35500.0
3008. Fc6h9-13+h=c6h10-13 1.00E+14 0.0 0.0
3009. c6h9=h+hex135 3.20E+13 0.0 40700.0
3010. c6h9+o2=ho2+hex135 1.60E+12 0.0 15160.0
3011. Ac6h9-15=c6h9 6.00E+08 1.0 12400.0
3012. Ac6h9-15=c2h2+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 33000.0
3013. Ac6h9-15+o2=Dc4h7-1+co+ch2o 4.50E+16 -1.4 1000.0
3014. Ac6h9-15+h=c6h10-15 1.00E+14 0.0 0.0

3015. hex135=chd13 4.50E+12 0.0 43300.0
3016. chd13=c6h6+h2 5.00E+14 0.0 65140.0
3017. chd13=c6h7C+h 5.01E+15 0.0 72598.0
3018. chd13+o2=c6h7C+ho2 8.31E+11 0.0 24858.0
3019. chd13+ho2=c6h7C+h2o2 4.00E+12 0.0 17057.0
3020. chd13+oh=c6h7C+h2o 5.60E+12 0.0 861.0
3021. chd13+o=c6h7C+oh 1.40E+13 0.0 -795.0
3022. chd13+h=c6h7C+h2 1.30E+13 0.0 4445.0
3023. chd13+ch3=c6h7C+ch4 1.23E+11 0.0 5201.0
3024. chd13+c2h5=c6h7C+c2h6 1.23E+11 0.0 5201.0
3025. chd13+c2h2=c6h6+c2h4 3.09E+10 0.0 27151.0
3026. chd13+c2h3=c6h7C+c2h4 1.23E+11 0.0 5201.0
3027. chd13+ac3h5=c6h7C+c3h6 1.23E+11 0.0 5201.0
3028. chd13+hco=c6h7C+ch2o 1.23E+11 0.0 5201.0
3029. chd13+ch3o=c6h7C+ch3oh 1.23E+11 0.0 5201.0
3030. chd13+nc4h5=c6h7C+c4h6 1.00E+11 0.0 13500.0
3031. chd13+ic4h5=c6h7C+c4h6 1.00E+11 0.0 13500.0
3032. chd14=c6h6+h2 2.30E+12 0.0 43800.0
3033. chd14=c6h7C+h 3.10E+14 0.0 77400.0
3034. chd14+o2=c6h7C+ho2 7.20E+12 0.0 27920.0
3035. chd14+ho2=c6h7C+h2o2 1.28E+04 2.6 12400.0
3036. chd14+h=c6h7C+h2 1.10E+05 2.5 -1900.0
3037. chd14+oh=c6h7C+h2o 6.00E+06 2.0 -1520.0
3038. chd14+ch3=c6h7C+ch4 2.00E+11 0.0 7300.0
3039. c2h2+nc4h5(+m)=c6h7C(+m) 4.80E+07 0.3 4700.0
Low pressure limit: 0.52000E+26 -0.42100E+01 0.40000E+04
3040. c6h7C=>c6h6+h 1.00E+10 0.0 0.0
3041. c6h7C+o2=c6h6+ho2 1.00E+12 0.0 0.0
3042. c6h7C+ho2=c6h6+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
3043. c6h7C+oh=c6h6+h2o 6.02E+12 0.0 0.0
3044. c6h7C+o=c6h6+oh 1.80E+13 0.0 0.0
3045. c6h7C+h=c6h6+h2 3.16E+12 0.0 0.0
3046. c6h7C+ch3=c6h6+ch4 1.00E+13 0.0 0.0
3047. c6h7C+c2h3=c6h6+c2h4 4.00E+12 0.0 0.0
3048. c6h7C+c2h5=c6h6+c2h6 4.00E+12 0.0 0.0
3049. c6h7C+ac3h5=c6h6+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
3050. c6h7C+sc3h5=c6h6+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
3051. c6h7C+tc3h5=c6h6+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
3052. c6h7C+hco=c6h6+ch2o 4.00E+12 0.0 0.0
3053. c6h7C+c6h7C=c6h6+chd13 8.40E+10 0.0 -300.0
3054. c6h7C+h=c6h615+h2 2.00E+13 0.0 0.0
3055. c6h7C+ho2=>CPD+hco+oh 4.50E+12 0.0 0.0
3056. c6h7C+o=CPD+hco 8.26E+13 0.0 0.0
3057. cyc5h8=c3h6+c2h2 2.50E+13 0.0 62970.0
3058. cyc5h8=CPD+h2 1.58E+13 0.0 59780.0
3059. cyc5h8+ho2=cyc5h7+h2o2 1.28E+04 2.6 12400.0
3060. cyc5h8+oh=cyc5h7+h2o 3.43E+09 1.2 -447.0
3061. cyc5h8+o=cyc5h7+oh 2.78E+11 0.0 2508.0
3062. cyc5h8+h=cyc5h7+h2 2.80E+13 0.0 2260.0
3063. cyc5h7=ac3h4+c2h3 3.16E+14 0.0 37000.0
3064. cyc5h7=CPD+h 3.16E+15 0.0 36000.0
3065. cyc5h7=c5h7 2.00E+13 0.0 30000.0
3066. cyc5h7+o2=acrol+ch2hco 4.00E+10 0.0 5000.0
3067. cyc5h7+o2=CPD+ho2 1.01E+12 0.0 13353.0
3068. cyc5h7+ho2=CPD+h2o2 2.65E+12 0.0 0.0
3069. cyc5h7+oh=CPD+h2o 6.02E+12 0.0 0.0
3070. cyc5h7+o=CPD+oh 1.80E+13 0.0 0.0

3071. cyc5h7+h=CPD+h2	3.16E+13	0.0	0.0
3072. cyc6h12=3c2h4	8.22E+17	0.0	87225.0
3073. cyc6h12=cyc6h11+h	3.00E+16	0.0	95000.0
3074. cyc6h12+o2=cyc6h11+ho2	7.50E+13	0.0	49000.0
3075. cyc6h12+ho2=cyc6h11+h2o2	1.20E+13	0.0	17057.0
3076. cyc6h12+oh=cyc6h11+h2o	1.60E+07	2.0	-681.0
3077. cyc6h12+o=cyc6h11+oh	1.54E+14	0.0	4497.0
3078. cyc6h12+h=cyc6h11+h2	6.00E+14	0.0	8373.0
3079. cyc6h12+ch3=cyc6h11+ch4	1.35E+12	0.0	9540.0
3080. cyc6h12+c2h5=cyc6h11+c2h6	1.35E+12	0.0	9540.0
3081. cyc6h12+c2h3=cyc6h11+c2h4	1.35E+12	0.0	9540.0
3082. cyc6h12+ac3h5=>cyc6h11+c3h6	1.35E+12	0.0	9540.0
3083. cyc6h12+sc3h5=cyc6h11+c3h6	1.35E+12	0.0	9540.0
3084. cyc6h12+tc3h5=cyc6h11+c3h6	1.35E+12	0.0	9540.0
3085. cyc6h12+C₄H₇-1=>cyc6h11+c4h8	7.00E+11	0.0	9540.0
3086. cyc6h12+hco=cyc6h11+ch2o	1.35E+12	0.0	9540.0
3087. cyc6h12+ch3o=cyc6h11+ch3oh	4.32E+11	0.0	4473.0
3088. cyc6h11+o2=cyc6h10+ho2	1.00E+09	0.0	3000.0
3089. cyc6h11+o=cyc6h10+oh	9.64E+13	0.0	0.0
3090. cyc6h11+ho2=cyc6h10+h2o2	2.00E+12	0.0	2000.0
3091. cyc6h11+oh=cyc6h10+h2o	4.80E+13	0.0	0.0
3092. cyc6h11+h=cyc6h10+h2	2.00E+11	0.0	0.0
3093. cyc6h11+ch3=cyc6h10+ch4	4.00E+12	0.0	0.0
3094. cyc6h11+c2h3=cyc6h10+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
3095. cyc6h11+c2h5=cyc6h10+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
3096. cyc6h11+ac3h5=cyc6h10+c3h6	4.00E+11	0.0	0.0
3097. cyc6h11+sc3h5=cyc6h10+c3h6	4.00E+11	0.0	0.0
3098. cyc6h11+tc3h5=cyc6h10+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
3099. cyc6h11+hco=cyc6h10+ch2o	4.00E+12	0.0	0.0
3100. cyc6h11=cyc6h10+h	5.00E+12	0.0	40000.0
3101. cyc6h11+o2=chxqjA	1.50E+09	0.0	0.0
3102. chxqjA=cyc6h10+ho2	2.85E+12	0.0	29000.0
3103. chxqjA=chxqArC	4.28E+09	1.0	28226.6
3104. chxqArC=chxo-AC+oh	1.40E+12	0.0	20000.0
3105. chxqArC+o2=chxqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3106. chxqAqjC=oh+chxoAqC	1.07E+09	1.0	24365.9
3107. chxqAqjC=chxqAqCrE	2.14E+09	1.0	28226.6
3108. chxoAqC=chxoAojC+oh	1.50E+16	0.0	42000.0
3109. Fc6oAoC=chxoAojC	1.00E+08	0.9	5900.0
3110. c2h4+ch2coch2hco=Fc6oAoC	1.32E+04	2.5	6130.0
3111. ch2co+ch2hco=ch2coch2hco	1.76E+04	2.5	6130.0
3112. Fc6oAoB=chxoAojC	1.00E+08	0.9	5900.0
3113. ch2co+c3h6cho-1=Fc6oAoE	1.32E+04	2.5	6130.0
3114. c6e5oAqC+oh=chxqAqCrE	4.76E+07	1.5	34700.0
3115. c6e5oAojC+oh=c6e5oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
3116. ac3h5hco+ch2hco=c6e5oAojC	1.00E+11	0.0	3496.0
3117. chxo-AC+oh=Cchxone+h2o	3.40E+06	1.9	-1451.0
3118. chxo-AC+h=Cchxone+h2	1.20E+06	2.4	2583.0
3119. chxo-AC+ch3=Cchxone+ch4	1.79E+04	2.3	6147.0
3120. chxo-AC+ho2=Cchxone+h2o2	3.00E+04	2.5	12260.0
3121. cyc6h10=c4h6+c2h4	1.50E+15	0.0	66900.0
3122. cyc6h10+o2=cyc6h9+ho2	7.20E+13	0.0	34800.0
3123. cyc6h10+o2=chxe1rD+ho2	4.00E+13	0.0	50700.0
3124. cyc6h10=cyc6h9+h	1.20E+15	0.0	83200.0
3125. cyc6h10=chxe1rD+h	1.20E+15	0.0	98900.0
3126. cyc6h10=chd13+h2	5.00E+13	0.0	61700.0
3127. cyc6h10+o=cyc6h9+oh	1.80E+11	0.7	3250.0
3128. cyc6h10+h=cyc6h9+h2	1.10E+05	2.5	-1900.0
3129. cyc6h10+oh=cyc6h9+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
3130. cyc6h10+ho2=cyc6h9+h2o2	1.30E+04	2.6	12400.0
3131. cyc6h10+ch3=cyc6h9+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
3132. cyc6h10+c2h3=cyc6h9+c2h4	2.00E+11	0.0	7300.0
3133. cyc6h10+c2h5=cyc6h9+c2h6	2.00E+11	0.0	7300.0
3134. cyc6h10+ac3h5=cyc6h9+c3h6	2.00E+11	0.0	7300.0
3135. cyc6h10+sc3h5=cyc6h9+c3h6	2.00E+11	0.0	7300.0
3136. cyc6h10+tc3h5=cyc6h9+c3h6	2.00E+11	0.0	7300.0
3137. cyc6h10+hco=cyc6h9+ch2o	2.00E+11	0.0	7300.0
3138. cyc6h10+ch3o=cyc6h9+ch3oh	2.00E+11	0.0	7300.0
3139. cyc6h10+o=chxe1rD+oh	5.20E+13	0.0	5200.0
3140. cyc6h10+h=chxe1rD+h2	1.80E+07	2.0	5000.0
3141. cyc6h10+oh=chxe1rD+h2o	5.20E+06	2.0	-770.0
3142. cyc6h10+ho2=chxe1rD+h2o2	8.00E+11	0.0	15500.0
3143. cyc6h10+ch3=chxe1rD+ch4	4.00E+11	0.0	9600.0
3144. chxone+oh=Bchxone+h2o	1.69E+12	0.0	-228.0
3145. chxone+h=Bchxone+h2	8.92E+06	2.0	3200.0
3146. chxone+o2=Bchxone+ho2	3.10E+13	0.0	41970.0
3147. chxone+ho2=Bchxone+h2o2	4.00E+11	0.0	8698.0
3148. chxone+ch3=Bchxone+ch4	3.48E+00	3.5	3680.0
3149. chxone+o=Bchxone+oh	6.14E+13	0.0	3400.0
3150. chxone+oh=Cchxone+h2o	1.10E+13	0.0	790.0
3151. chxone+h=Cchxone+h2	2.60E+06	2.4	2583.0
3152. chxone+o2=Cchxone+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0
3153. chxone+ho2=Cchxone+h2o2	1.93E+04	2.6	13910.0
3154. chxone+ch3=Cchxone+ch4	3.02E+00	3.5	5481.0
3155. chxone+o=Cchxone+oh	1.10E+06	2.5	2830.0
3156. chxone+oh=Dchxone+h2o	5.50E+12	0.0	790.0
3157. chxone+h=Dchxone+h2	1.30E+06	2.4	2583.0
3158. chxone+o2=Dchxone+ho2	7.00E+12	0.0	49910.0
3159. chxone+ho2=Dchxone+h2o2	9.51E+03	2.6	13910.0
3160. chxone+ch3=Dchxone+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
3161. chxone+o=Dchxone+oh	5.50E+05	2.5	2830.0
3162. Bchxone=h+chxe2oA	1.20E+13	0.0	38200.0
3163. Bchxone+o2=chxe2oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
3164. Fc6e1oC=Bchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
3165. Cchxone=h+chxe2oA	1.20E+13	0.0	33820.0
3166. Cchxone=h+chxe3oA	1.20E+13	0.0	38115.0
3167. Cchxone+o2=chxe2oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
3168. Cchxone+o2=chxe3oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
3169. c6e5oyA=Cchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
3170. Ac6e5oC=Cchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
3171. c2h4+ac3h5co=Ac6e5oC	1.00E+11	0.0	7800.0
3172. Dchxone=h+chxe3oA	1.20E+13	0.0	37315.0
3173. Dchxone+o2=chxe3oA+ho2	1.00E+09	0.0	0.0
3174. Ac6e5oB=Dchxone	1.00E+08	0.9	5900.0
3175. ch2co+Dc4h7-1=Ac6e5oB	3.33E+10	0.0	6397.0
3176. Bchxone+o2=chxoqjB	2.43E+39	-9.0	8620.0
3177. chxoqjB=DchxoqB	3.72E+11	0.0	24076.6
3178. DchxoqB+o2=chxoqBqjD	7.54E+12	0.0	0.0
3179. DchxoqB=c6e5oAoB+oh	5.50E+13	0.0	25500.0
3180. chxoqBqjD=chxoAoBqD+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
3181. chxoAoBqD=chxoAoBojD+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
3182. Fc6oAoDoE=chxoAoBojD	1.00E+08	0.9	5900.0
3183. Fc6oAoCoD=chxoAoBojD	1.00E+08	0.9	5900.0
3184. Fc6oAoDoE=ch2co+choch2ch2co	2.00E+13	0.0	21350.0
3185. Fc6oAoCoD=c2h4+2co+ch2hco	2.00E+13	0.0	28700.0
3186. c6e5oAoB+oh=c6e5oyAoB+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
3187. c6e5oAoB+h=c6e5oyAoB+h2	4.10E+09	1.2	2405.0
3188. c6e5oAoB+ho2=c6e5oyAoB+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
3189. c6e5oAoB+ch3=c6e5oyAoB+ch4	7.60E+00	3.4	3740.0
3190. c6e5oAoB+o2=c6e5oyAoB+ho2	3.00E+13	0.0	39200.0
3191. c6e5oyAoB=c4h7co-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
3192. c6e5oyAoB+ho2=>c4h7co-1+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
3193. c6e5oA+oh=c6e5oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
3194. c6e5oA+h=c6e5oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
3195. c6e5oA+ho2=c6e5oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
3196. c6e5oyA=Ec5h9-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
3197. c6e5oyA+ho2=>Ec5h9-1+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
3198. c6e5oA+oh=h2o+c4h6+ch2hco	1.41E+07	1.8	974.0
3199. c6e5oA+ho2=h2o2+c4h6+ch2hco	1.20E+13	0.0	19400.0
3200. c6e5oA+ch3=ch4+c4h6+ch2hco	1.30E+12	0.0	11600.0
3201. c6e5oA+h=h2+c4h6+ch2hco	5.70E+07	2.0	7700.0
3202. c6e5oA+o=oh+c4h6+ch2hco	4.36E+06	2.4	5500.0
3203. chxe2oA+o2=>Dchxe2oA+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
3204. chxe2oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3205. chxe2oA+oh=>Dchxe2oA+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3206. chxe2oA+o=>Dchxe2oA+oh	2.60E+12	0.0	4500.0
3207. chxe2oA+h=>Dchxe2oA+h2	1.95E+13	0.0	4445.0
3208. chxe2oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3209. chxe3oA+o2=>Dchxe2oA+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
3210. chxe3oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3211. chxe3oA+oh=>Dchxe2oA+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3212. chxe3oA+o=>Dchxe2oA+oh	2.60E+12	0.0	4500.0
3213. chxe3oA+h=>Dchxe2oA+h2	1.95E+13	0.0	4445.0
3214. chxe3oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3215. Dchxe2oA+o2=ho2+che24one	5.90E+05	0.0	0.0
3216. Ac6e3e5oB=Dchxe2oA	1.00E+08	0.9	5900.0
3217. ch2co+nc4h5=Ac6e3e5oB	2.00E+11	0.0	2010.0
3218. chxoAoD+oh=BchxoAoD+h2o	3.38E+12	0.0	-228.0
3219. chxoAoD+h=BchxoAoD+h2	1.79E+07	2.0	3200.0
3220. chxoAoD+ho2=BchxoAoD+h2o2	8.00E+11	0.0	8698.0
3221. chxe2oAoD+h=BchxoAoD	6.25E+11	0.5	2620.0
3222. c6e1oCoyF=BchxoAoD	1.00E+08	0.9	5900.0
3223. c6e1oCoyF=co+pc2h4coc2h3	2.00E+13	0.0	28700.0
3224. chxe2oAoD+oh=Echxe2oAoD+h2o	1.69E+12	0.0	-228.0
3225. chxe2oAoD+h=Echxe2oAoD+h2	8.96E+06	2.0	3200.0
3226. chxe2oAoD+ho2=Echxe2oAoD+h2o2	4.00E+11	0.0	8698.0
3227. c6h4o2+h=Echxe2oAoD	6.25E+11	0.5	2620.0
3228. c6e2e5oyAoD=Echxe2oAoD	1.00E+08	0.9	5900.0
3229. c6e2e5oyAoD=co+c2h3co+c2h2	2.00E+13	0.0	28700.0
3230. Gc7h13-1=mchA	1.00E+08	0.9	5900.0
3231. Gc7h13-1=Dc7h13-1	1.00E+11	0.0	18100.0
3232. c2h4+Ec5h9-1=Gc7h13-1	2.64E+04	2.5	6130.0
3233. mchA+o2=mche1+ho2	8.00E+12	0.0	10000.0
3234. mchA+h=mche1+h2	2.00E+11	0.0	0.0
3235. mchA+oh=mche1+h2o	5.00E+13	0.0	0.0
3236. mchA+o=mche1+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3237. mchA+ch3=mche1+ch4	4.00E+12	0.0	0.0
3238. mchB=c2h4+isoph	2.00E+13	0.0	45000.0
3239. mchB+h=mche1+h2	2.00E+11	0.0	0.0
3240. mchB+oh=mche1+h2o	5.00E+13	0.0	0.0
3241. mchB+o=mche1+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3242. mchB+ch3=mche1+ch4	4.00E+12	0.0	0.0
3243. mche1=>c4h6+c3h6	1.00E+16	0.0	71000.0
3244. mche1+oh=cyc6h11+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
3245. mche1+oh=ch3+chxone	1.00E+12	0.0	0.0
3246. mche1+h=mchB	2.64E+13	0.0	2160.0
3247. mche1+h=mchA	1.32E+13	0.0	4660.0
3248. mche1+h=Cmche1+h2	1.10E+05	2.5	-1900.0
3249. mche1+o=Cmche1+oh	1.80E+11	0.7	3250.0
3250. mche1+oh=Cmche1+h2o	6.00E+06	2.0	-1520.0
3251. mche1+ho2=Cmche1+h2o2	1.30E+04	2.6	12400.0
3252. mche1+ch3=Cmche1+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
3253. mche1+o2=Dmche1+ho2	4.00E+13	0.0	50700.0
3254. mche1+o=Dmche1+oh	5.20E+13	0.0	5200.0
3255. mche1+h=Dmche1+h2	1.80E+07	2.0	5000.0
3256. mche1+oh=Dmche1+h2o	5.20E+06	2.0	-770.0
3257. mche1+ho2=Dmche1+h2o2	8.00E+11	0.0	15500.0
3258. mche1+ch3=Dmche1+ch4	4.00E+11	0.0	9600.0
3259. mche1+oh=BmchohA	4.75E+12	0.0	-782.0
3260. BmchohA+o2=mchohAqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3261. mchohAqjB=>oh+ch2o+chxone	1.00E+16	0.0	25000.0
3262. Cmche1=>c2h4+isopy	2.00E+13	0.0	38000.0
3263. Cmche1=h+mche13	1.20E+13	0.0	43500.0
3264. Cmche1+o2=ch2co+Ec5oA	3.01E+10	0.0	2870.0
3265. Dmche1+o2=ho2+mche13	9.60E+12	0.0	2500.0
3266. Dmche1=h+mche13	3.20E+13	0.0	34500.0
3267. Dmche1+o2=ho2+mche14	9.60E+12	0.0	5000.0
3268. Dmche1=h+mche14	3.00E+13	0.0	33800.0
3269. mche13+h=Emche13+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3270. mche13+o=Emche13+oh	1.30E+12	0.0	4500.0
3271. mche13+oh=Emche13+h2o	3.00E+12	0.0	1230.0
3272. mche13+ho2=Emche13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3273. mche13+ch3=Emche13+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3274. mche13+h=Gmche13+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3275. mche13+o=Gmche13+oh	1.30E+12	0.0	4500.0
3276. mche13+oh=Gmche13+h2o	3.00E+12	0.0	1230.0
3277. mche13+ho2=Gmche13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3278. mche13+ch3=Gmche13+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3279. mche14+h=Emche13+h2	5.50E+04	2.5	-1900.0
3280. mche14+o=Emche13+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
3281. mche14+oh=Emche13+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
3282. mche14+ho2=Emche13+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
3283. mche14+ch3=Emche13+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3284. mche14+h=Gmche14+h2	5.50E+04	2.5	-1900.0
3285. mche14+o=Gmche14+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
3286. mche14+oh=Gmche14+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
3287. mche14+ho2=Gmche14+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
3288. mche14+ch3=Gmche14+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3289. mche14+h=Fmche14+h2	5.50E+04	2.5	-1900.0
3290. mche14+o=Fmche14+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
3291. mche14+oh=Fmche14+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
3292. mche14+ho2=Fmche14+h2o2	6.50E+03	2.6	12400.0
3293. mche14+ch3=Fmche14+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3294. Gmche13+o2=mche136+ho2	2.00E+09	0.0	-1506.0
3295. Emche13+o2=mche135+ho2	2.00E+09	0.0	-1506.0
3296. Gmche14+o2=mche135+ho2	9.60E+12	0.0	2500.0
3297. Fmche14+o2=mche135+ho2	9.60E+12	0.0	2500.0
3298. mche135+h=phch2+h2	5.50E+04	2.5	-1900.0

3299. mche135+o=phch2+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
3300. mche135+oh=phch2+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
3301. mche135+ho2=phch2+h2o2 6.50E+03 2.6 12400.0
3302. mche135+ch3=phch2+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
3303. mche136+h=phch2+h2 5.50E+04 2.5 -1900.0
3304. mche136+o=phch2+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
3305. mche136+oh=phch2+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
3306. mche136+ho2=phch2+h2o2 6.50E+03 2.6 12400.0
3307. mche136+ch3=phch2+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
3308. mchoA+oh=chxco+h2o 4.20E+12 0.0 500.0
3309. mchoA+h=chxco+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
3310. mchoA+ho2=chxco+h2o2 1.00E+12 0.0 10000.0
3311. chxco=cyc6h11+co 2.00E+13 0.0 28700.0
3312. chxco+ho2=>cyc6h11+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
3313. c7e6oyA=AmchoC 1.00E+08 0.9 5900.0
3314. Gc7e1oC=AmchoC 1.00E+08 0.9 5900.0
3315. c2h4+Ec5e1oC=Gc7e1oC 1.32E+04 2.5 6130.0
3316. c2h4+c2h3co=Ec5e1oC 1.00E+11 0.0 7800.0
3317. Ac7e6oB=AmchoD 1.00E+08 0.9 5900.0
3318. Gc7e1oD=AmchoD 1.00E+08 0.9 5900.0
3319. Cc5h9-1+ch2co=Ac7e6oB 1.00E+11 0.0 11900.0
3320. c2h4+Ac5e4oB=Gc7e1oD 1.32E+04 2.5 6130.0
3321. ch2co+ac3h5=Ac5e4oB 1.00E+11 0.0 11900.0
3322. Gc7e1oF=AmchoD 1.00E+08 0.9 5900.0
3323. ch2co+Ec5h9-1=Gc7e1oF 1.76E+04 2.5 6130.0
3324. echA=c2h4+cyc6h11 2.00E+13 0.0 29000.0
3325. echA+o2=eche1+ho2 8.00E+12 0.0 10000.0
3326. echA+h=eche1+h2 2.00E+11 0.0 0.0
3327. echA+oh=eche1+h2o 5.00E+13 0.0 0.0
3328. echA+o=eche1+oh 1.00E+14 0.0 0.0
3329. echA+ch3=eche1+ch4 4.00E+12 0.0 0.0
3330. eche1=>c4h6+c2h4+c2h4 1.00E+16 0.0 71000.0
3331. eche1+oh=mchA+ch2o 2.60E+13 0.0 0.0
3332. eche1+h=Ceche1+h2 9.75E+12 0.0 4445.0
3333. eche1+o=Ceche1+oh 1.30E+12 0.0 4500.0
3334. eche1+oh=Ceche1+h2o 2.09E+06 2.0 -543.0
3335. eche1+ho2=Ceche1+h2o2 5.00E+10 0.0 17060.0
3336. eche1+o2=Ceche1+ho2 2.00E+12 0.0 40000.0
3337. eche1+ch3=Ceche1+ch4 5.00E+10 0.0 7300.0
3338. Ceche1=>2c2h4+ic4h5 2.00E+13 0.0 38900.0
3339. echoA+oh=>h2o+echoyA 4.20E+12 0.0 500.0
3340. echoA+h=>h2+echoyA 4.00E+13 0.0 4200.0
3341. echoA+ho2=>h2o2+echoyA 1.00E+12 0.0 10000.0
3342. echoyA=>co+mchA 2.00E+13 0.0 28700.0
3343. echoyA+ho2=>oh+co2+mchA 2.00E+13 0.0 0.0
3344. echoAoD+oh=echoyAoD+h2o 4.20E+12 0.0 500.0
3345. echoAoD+h=echoyAoD+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
3346. echoAoD+ho2=echoyAoD+h2o2 1.00E+12 0.0 10000.0
3347. echoyAoD=AmchoC+co 2.00E+13 0.0 28700.0
3348. echoyAoD+ho2=>AmchoC+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
3349. mchoAoC+oh=h2o+mchoyAoC 4.20E+12 0.0 500.0
3350. mchoAoC+h=h2+mchoyAoC 4.00E+13 0.0 4200.0
3351. mchoAoC+ho2=h2o2+mchoyAoC 1.00E+12 0.0 10000.0
3352. mchoyAoC=co+Bchxone 2.00E+13 0.0 28700.0
3353. mchoyAoC+ho2=>Bchxone+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
3354. c6h615=hex1245 1.80E+11 0.0 35804.0
3355. hex1245=mc6h6 5.00E+11 0.0 22081.0
3356. mc6h6=fulvene 4.26E+13 0.0 49282.0
3357. mc6h6=c6h6 3.79E+13 0.0 22000.0
3358. CPD+ho2=c5h5+h2o2 2.00E+12 0.0 11660.0
3359. CPD+oh=c5h5+h2o 3.43E+09 1.2 -447.0
3360. CPD+h=c5h5+h2 2.19E+08 1.8 3000.0
3361. CPD+h=c3h3+c2h4 2.00E+14 0.0 10000.0
3362. CPD+o=c5h5+oh 1.81E+13 0.0 3080.0
3363. CPD+ch3=c5h5+ch4 3.11E+11 0.0 5500.0
3364. CPD+c2h3=c5h5+c2h4 3.11E+11 0.0 5500.0
3365. CPD+c2h5=c5h5+c2h6 3.11E+11 0.0 5500.0
3366. CPD+nc4h5=c5h5+c4h6 3.11E+11 0.0 5500.0
3367. CPD+ic4h5=c5h5+c4h6 3.11E+11 0.0 5500.0
3368. CPD+c6h5=c5h5+c6h6 3.11E+11 0.0 5500.0
3369. c5h5+ho2=c5h5o+oh 3.00E+13 0.0 0.0
3370. c5h5+oh=c5h4oh+h 9.00E+13 0.0 0.0
3371. c5h5+oh=c4h6+co 4.00E+14 0.0 4500.0
3372. c5h5+h(+m)=CPD(+m) 1.00E+14 0.0 0.0
Low pressure limit: 0.44000E+81 -0.18280E+02 0.12994E+05
TROE centering: 0.68000E-01 0.40000E+03 0.41360E+04 0.55000E+04
3373. c5h5+o=c5h4o+h 5.81E+13 0.0 20.0
3374. c5h5+o=nc4h5+co 2.00E+14 0.0 0.0
3375. c5h4oh=c5h4o+h 2.10E+13 0.0 48000.0
3376. c5h5o=nc4h5+co 2.51E+11 0.0 43900.0
3377. c5h4o+h=nc4h5+co 2.10E+61 -13.3 40810.0
3378. c5h4o=>co+c4h4 1.00E+12 0.0 53000.0
3379. c3h3+ac3h4=c6h6+h 1.40E+12 0.0 12800.0
3380. c4h4+c2h3=c6h6+h 1.90E+12 0.0 3510.0
3381. nc4h3+c2h3=c6h6 2.87E+14 0.0 817.0
3382. c6h6=c4h4+c2h2 9.00E+15 0.0 107430.0
3383. c6h6+o2=c6h5+ho2 6.30E+13 0.0 60000.0
3384. c6h6+ho2=c6h5+h2o2 5.40E+04 2.5 27620.0
3385. c6h6+oh=c6h5+h2o 1.69E+13 0.0 4574.0
3386. c6h6+h=c6h5+h2 2.50E+14 0.0 16000.0
3387. c6h6+o=c6h5o+h 3.56E+01 3.8 940.0
3388. c6h6+ch3=c6h5+ch4 2.00E+12 0.0 15000.0
3389. c6h6+c2h5=c6h5+c2h6 2.00E+12 0.0 15000.0
3390. c6h6+c2h3=c6h5+c2h4 2.00E+12 0.0 15000.0
3391. c6h6+nc4h5=c6h5+c4h6 2.00E+12 0.0 15000.0
3392. c6h6+ic4h5=c6h5+c4h6 2.00E+12 0.0 15000.0
3393. c6h6+o=c6h5+oh 2.00E+13 0.0 14700.0
3394. nc4h3+c2h2=c6h5 2.80E+03 2.9 1400.0
3395. c6h5+o2=c6h5o+o 6.27E+12 0.0 7470.0
3396. c6h4o2=c5h4o+co 1.00E+12 0.0 40000.0
3397. c6h5+h=c6h6 2.20E+14 0.0 0.0
3398. c6h5+ho2=c6h5o+oh 5.00E+13 0.0 1000.0
3399. c6h5+oh=c6h5o+h 5.00E+13 0.0 0.0
3400. c6h5+c2h=phc2h 3.00E+08 0.0 1391.0
3401. c6h5+c2h4=styren+h 1.43E+08 1.2 3540.0
3402. c6h5+c2h2=phc2h+h 1.00E+13 0.0 7647.0
3403. c6h5+c4h2=phc2h+c2h 2.00E+13 0.0 0.0
3404. c6h5+c4h4=phc2h+c2h3 1.00E+13 0.0 7647.0
3405. c6h5oh+oh=c6h5o+h2o 6.00E+12 0.0 0.0
3406. c6h5oh+h=c6h6+oh 2.21E+13 0.0 7910.0
3407. c6h5oh+h=c6h5o+h2 1.15E+14 0.0 12400.0
3408. c6h5oh+o=c6h5o+oh 2.81E+13 0.0 7352.0
3409. c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4 3.00E+02 3.0 7650.0
3410. c6h5oh+c2h5=c6h5o+c2h6 3.00E+02 3.0 7650.0
3411. c6h5oh+c2h3=c6h5o+c2h4 3.00E+02 3.0 7650.0
3412. c6h5oh+nc4h5=c6h5o+c4h6 3.00E+02 3.0 7650.0
3413. c6h5oh+ic4h5=c6h5o+c4h6 3.00E+02 3.0 7650.0
3414. c6h5o+CPD=c6h5oh+c5h5 3.20E+11 0.0 8000.0
3415. c6h5oh+c6h5=c6h5o+c6h6 3.00E+02 3.0 7650.0
3416. c6h5o=c5h5+co 7.40E+11 0.0 43917.0
3417. c6h5o+h(+m)=c6h5oh(+m) 2.50E+14 0.0 0.0
Low pressure limit: 0.10000E+95 -0.21840E+02 0.13880E+05
TROE centering: 0.43000E-01 0.30400E+03 0.60000E+05 0.59000E+04
3418. c6h5o+h=CPD+co 1.06E+53 -10.7 41360.0
3419. c6h5o+o=c5h5+co2 1.00E+13 0.0 0.0
3420. che24one=>c6h5o+h 1.40E+15 0.0 54000.0
3421. che24one+h=cyc5h7+co 2.51E+13 0.0 4700.0
3422. che24one+o2=c6h5o+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
3423. che24one+ho2=c6h5o+h2o2 9.63E+03 2.6 13910.0
3424. che24one+oh=c6h5o+h2o 3.12E+06 2.0 -298.0
3425. che24one+o=c6h5o+oh 2.60E+12 0.0 4500.0
3426. che24one+h=c6h5o+h2 1.95E+13 0.0 4445.0
3427. che24one+ch3=c6h5o+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
3428. nc4h5+ac3h4=toluen+h 2.00E+11 0.0 3700.0
3429. nc4h5+pc3h4=toluen+h 6.32E+11 0.0 3700.0
3430. toluen=c6h5+ch3 1.40E+16 0.0 99800.0
3431. toluen=phch2+h 3.00E+15 0.0 88194.0
3432. toluen+o2=phch2+ho2 3.00E+14 0.0 43062.0
3433. toluen+ho2=phch2+h2o2 3.00E+14 0.0 22010.0
3434. toluen+oh=phch2+h2o 1.77E+05 2.4 -602.0
3435. toluen+oh=c6h5oh+ch3 7.83E+02 2.9 3221.0
3436. toluen+o=phch2+oh 6.30E+11 0.0 0.0
3437. toluen+h=phch2+h2 1.26E+14 0.0 8364.0
3438. toluen+h=c6h6+ch3 2.40E+13 0.0 5123.0
3439. toluen+ch3=phch2+ch4 8.88E+10 0.0 8754.0
3440. toluen+c2h5=phch2+c2h6 1.01E+11 0.0 9514.0
3441. toluen+c6h5=phch2+c6h6 2.10E+12 0.0 4400.0
3442. toluen+nc4h5=phch2+c4h6 4.00E+12 0.0 7500.0
3443. toluen+c2h3=phch2+c2h4 4.00E+12 0.0 7500.0
3444. phch2=c4h4+c3h3 2.00E+14 0.0 83600.0
3445. phch2=c5h5+c2h2 6.03E+13 0.0 70000.0
3446. phch2+o2=phhco+oh 6.31E+12 0.0 43000.0
3447. phch2+ho2=phch2o+oh 2.00E+13 0.0 0.0
3448. phch2+oh=phch2oh 2.00E+13 0.0 0.0
3449. phch2+o=phhco+h 1.58E+13 0.0 0.0
3450. phch2+o=c6h5+ch2o 1.00E+13 0.0 0.0
3451. phch2+c3h3=toluen+c3h2 1.00E+12 0.0 0.0
3452. phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o 1.05E+11 0.0 9500.0
3453. phch2oh+o2=>phhco+ho2+h 2.00E+14 0.0 41400.0
3454. phch2oh+oh=>phhco+h2o+h 8.43E+12 0.0 2583.0
3455. phch2oh+h=c6h6+ch2oh 1.20E+13 0.0 5148.0
3456. phch2oh+phch2=>phhco+toluen+h 2.11E+11 0.0 9500.0
3457. phch2oh+c6h5=>phhco+c6h6+h 1.40E+12 0.0 4400.0
3458. phch2o=phhco+h 1.30E+14 0.0 1100.0
3459. phhco=phco+h 3.98E+15 0.0 83701.0
3460. phhco+o2=phco+ho2 1.02E+13 0.0 39000.0
3461. phhco+ho2=phco+h2o2 2.00E+12 0.0 11665.0
3462. phhco+oh=phco+h2o 1.71E+09 1.2 -447.0
3463. phhco+oh=c6h5oh+hco 1.20E+13 0.0 5123.0
3464. phhco+o=phco+oh 9.04E+12 0.0 3080.0
3465. phhco+h=phco+h2 5.00E+13 0.0 4928.0
3466. phhco+h=c6h6+hco 1.20E+13 0.0 5148.0
3467. phhco+ch3=phco+ch4 2.77E+03 2.8 5773.0
3468. phhco+c6h5=phco+c6h6 7.01E+11 0.0 4400.0
3469. phco=c6h5+co 3.98E+14 0.0 29401.0
3470. phco+o2=c6h5o+co2 3.00E+10 0.0 2870.0
3471. phco+ho2=>c6h5+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
3472. phc2h5=c6h6+c2h4 1.15E+09 0.0 51699.0
3473. phc2h5=phch2+ch3 5.00E+16 0.0 78127.0
3474. phc2h5=c6h5+c2h5 5.00E+16 0.0 100399.0
3475. phc2h5=Bphc2h4+h 2.51E+15 0.0 81260.0
3476. phc2h5=Aphc2h4+h 8.00E+15 0.0 100226.0
3477. phc2h5+o2=Aphc2h4+ho2 4.00E+13 0.0 50620.0
3478. phc2h5+o2=Bphc2h4+ho2 4.00E+13 0.0 38220.0
3479. phc2h5+h=c2h5+c6h6 2.40E+13 0.0 5123.0
3480. phc2h5+h=Aphc2h4+h2 7.20E+08 1.5 7412.0
3481. phc2h5+h=Bphc2h4+h2 3.30E+07 2.0 5346.0
3482. phc2h5+oh=Aphc2h4+h2o 1.99E+07 1.8 1133.0
3483. phc2h5+oh=Bphc2h4+h2o 7.09E+06 1.9 -1159.0
3484. phc2h5+o=Aphc2h4+oh 5.00E+08 1.5 5802.0
3485. phc2h5+o=Bphc2h4+oh 5.49E+05 2.5 2140.0
3486. phc2h5+ho2=Aphc2h4+h2o2 1.80E+04 2.5 16792.0
3487. phc2h5+ho2=Bphc2h4+h2o2 6.80E+03 2.5 10115.0
3488. phc2h5+ch3=Aphc2h4+ch4 2.75E-01 4.0 8287.0
3489. phc2h5+ch3=Bphc2h4+ch4 7.50E-01 3.5 4485.0
3490. Aphc2h4=styren+h 3.16E+13 0.0 50670.0
3491. Aphc2h4+c6h5=c2h4 1.00E+14 0.0 35000.0
3492. Bphc2h4=styren+h 1.80E+13 0.0 47025.0
3493. Bphc2h4+o2=styren+ho2 1.58E+12 0.0 15200.0
3494. Bphc2h4+o=c6h5+ch3hco 1.60E+13 0.0 0.0
3495. Bphc2h4+o=phhco+ch3 1.60E+13 0.0 0.0
3496. Bphc2h4+oh=phhco+ch4 1.60E+13 0.0 0.0
3497. Bphc2h4+ho2=>phhco+ch3+oh 5.00E+12 0.0 0.0
3498. nc4h5+c4h4=styren+h 3.16E+11 0.0 3700.0
3499. c4h4+c4h4=styren 1.48E+14 0.0 38003.0
3500. c6h5+c2h3=styren 1.00E+13 0.0 0.0
3501. styren=c6h6+c2h2 1.60E+11 0.0 58438.0
3502. styren=ASTYRYL+h 5.00E+15 0.0 109400.0
3503. styren=BSTYRYL+h 5.00E+15 0.0 109400.0
3504. styren+o2=ASTYRYL+ho2 4.00E+13 0.0 59800.0
3505. styren+o2=BSTYRYL+ho2 4.00E+13 0.0 59800.0
3506. styren+oh=ASTYRYL+h2o 5.00E+12 0.0 6936.0
3507. styren+oh=BSTYRYL+h2o 5.00E+12 0.0 5936.0
3508. styren+h=ASTYRYL+h2 5.00E+13 0.0 15009.0
3509. styren+h=BSTYRYL+h2 5.00E+13 0.0 14009.0
3510. styren+ho2=ASTYRYL+h2o2 7.50E+10 0.0 14190.0
3511. styren+ho2=BSTYRYL+h2o2 7.50E+10 0.0 13190.0
3512. styren+o=phch2+hco 1.20E+08 1.4 530.0
3513. styren+o=c6h5+ch2hco 6.00E+07 1.4 530.0
3514. styren+c6h5=ASTYRYL+c6h6 2.00E+11 0.0 20000.0
3515. styren+c6h5=BSTYRYL+c6h6 2.00E+11 0.0 19000.0
3516. styren+c6h5o=ASTYRYL+c6h5oh 2.00E+11 0.0 20000.0
3517. styren+c6h5o=BSTYRYL+c6h5oh 2.00E+11 0.0 19000.0
3518. styren+c5h5=ASTYRYL+CPD 2.00E+11 0.0 20000.0
3519. styren+c5h5=BSTYRYL+CPD 2.00E+11 0.0 19000.0
3520. styren+oh=c6h4c2h3+h2o 1.63E+07 1.4 1454.0
3521. styren+h=>c6h4c2h3+h2 1.90E+07 2.0 9698.0
3522. styren+ho2=>phch2+hco+oh 2.50E+12 1.0 25000.0

3523. styren+ho2=>phhco+ch2+oh	2.50E+12	1.0	25000.0
3524. styren+h=c6h6+c2h3	2.40E+13	0.0	5123.0
3525. ASTYRYL+h=BSTYRYL+h	1.00E+14	0.0	0.0
3526. ASTYRYL=c6h5+c2h2	1.00E+14	0.0	36850.0
3527. ASTYRYL=phc2h+h	3.00E+12	0.0	37830.0
3528. ASTYRYL+o2=phhco+hco	2.00E+11	0.0	14000.0
3529. ASTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6	1.00E+13	0.0	0.0
3530. BSTYRYL+o2=phco+ch2o	2.00E+11	0.0	14000.0
3531. BSTYRYL+o=c6h5+ch2co	1.60E+13	0.0	0.0
3532. BSTYRYL=phc2h+h	3.00E+12	0.0	48030.0
3533. BSTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6	1.00E+13	0.0	0.0
3534. BSTYRYL+oh=phc2h+h2o	2.00E+13	0.0	0.0
3535. BSTYRYL+h=phc2h+h2	5.00E+13	0.0	0.0
3536. phch2hco+o2=>phch2co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
3537. phch2hco+ho2=>phch2co+h2o2	4.10E+04	2.5	10204.0
3538. phch2hco+oh=>phch2co+h2o	2.69E+08	1.4	-1574.0
3539. phch2hco+o=>phch2co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
3540. phch2hco+h=>phch2co+h2	4.10E+09	1.2	2404.0
3541. phch2hco+ch3=>phch2co+ch4	3.50E-08	6.2	1639.0
3542. phch2hco=>phch2+hco	5.00E+16	0.0	71600.0
3543. phch2hco+h=c6h6+ch2hco	5.78E+13	0.0	8088.0
3544. phch2co=phch2+co	3.98E+14	0.0	29401.0
3545. phch2co+o2=phch2o+co2	3.00E+10	0.0	2870.0
3546. phch2co+ho2=>phch2+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
3547. phcoch2=c6h5+ch2co	2.00E+13	0.0	51940.0
3548. phc2h+oh=>c6h6+hcco	1.00E+13	0.0	0.0
3549. phc2h+h=c6h4c2h+h2	5.00E+13	-0.5	1500.0
3550. phc2h+oh=c6h4c2h+h2o	1.05E+13	0.0	4565.0
3551. phc2h+c2h=c6h4c2h+c2h2	2.00E+13	0.0	0.0
3552. phc2h+o=c6h5cco+h	4.80E+09	1.0	0.0
3553. phc2h+ch3=c6h4c2h+ch4	1.67E+12	0.0	15057.0
3554. c6h4c2h+c2h2=A1c2hAC	1.90E+21	-2.9	8100.0
3555. c6h4c2h+c2h2=A2-X	5.10E+48	-10.5	28000.0
3556. c6h4c2h+h=phc2h	4.20E+11	0.5	-71.7
3557. c6h5cco+o2=phco+co2	1.00E+12	0.0	0.0
3558. pbz=c6h5+nc3h7	1.00E+17	0.0	86500.0
3559. pbz=phch2+c2h5	8.00E+15	0.0	73500.0
3560. pbz=Aphc2h4+ch3	1.00E+17	0.0	77500.0
3561. pbz=pbzjA+h	9.00E+15	0.0	100210.0
3562. pbz=pbzjB+h	6.00E+15	0.0	99110.0
3563. pbz=pbzjC+h	6.00E+15	0.0	86210.0
3564. pbz+o2=pbzjA+ho2	4.00E+13	0.0	50600.0
3565. pbz+o2=pbzjB+ho2	4.00E+13	0.0	49500.0
3566. pbz+o2=pbzjC+ho2	4.00E+13	0.0	35800.0
3567. pbz+h=nc3h7+c6h6	2.40E+13	0.0	5123.0
3568. pbz+h=pbzjA+h2	1.33E+06	2.5	6756.0
3569. pbz+h=pbzjB+h2	1.30E+06	2.4	4470.0
3570. pbz+h=pbzjC+h2	1.01E+04	2.9	1931.0
3571. pbz+o=pbzjA+oh	1.93E+05	2.7	3716.0
3572. pbz+o=pbzjB+oh	4.77E+04	2.7	2106.0
3573. pbz+o=pbzjC+oh	4.77E+04	2.7	1106.0
3574. pbz+oh=pbzjA+h2o	3.16E+07	1.8	934.0
3575. pbz+oh=pbzjB+h2o	7.08E+06	1.9	-159.0
3576. pbz+oh=pbzjC+h2o	2.65E+12	0.0	0.0
3577. pbz+ho2=pbzjA+h2o2	4.76E+04	2.5	16494.0
3578. pbz+ho2=pbzjB+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
3579. pbz+ho2=pbzjC+h2o2	9.64E+03	2.6	12910.0
3580. pbz+ch3=pbzjA+ch4	2.75E-01	3.6	7150.0
3581. pbz+ch3=pbzjB+ch4	6.00E+11	0.0	10120.0
3582. pbz+ch3=pbzjC+ch4	6.00E+11	0.0	10120.0
3583. pbz+c2h3=pbzjA+c2h4	6.00E+02	3.3	10502.0
3584. pbz+c2h3=pbzjB+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
3585. pbz+c2h3=pbzjC+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
3586. pbz+c2h5=pbzjA+c2h6	3.16E+11	0.0	12300.0
3587. pbz+c2h5=pbzjB+c2h6	5.01E+10	0.0	10400.0
3588. pbz+c2h5=pbzjC+c2h6	5.01E+10	0.0	10400.0
3589. pbz+ac3h5=pbzjA+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
3590. pbz+ac3h5=pbzjB+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3591. pbz+ac3h5=pbzjC+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3592. pbz+tc3h5=pbzjA+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
3593. pbz+tc3h5=pbzjB+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3594. pbz+tc3h5=pbzjC+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3595. pbz+sc3h5=pbzjA+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
3596. pbz+sc3h5=pbzjB+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3597. pbz+sc3h5=pbzjC+c3h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3598. pbz+c6h5=pbzjA+c6h6	7.94E+11	0.0	20500.0
3599. pbz+c6h5=pbzjB+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3600. pbz+c6h5=pbzjC+c6h6	7.94E+11	0.0	16200.0
3601. pbz+phch2=pbzjA+toluen	7.94E+11	0.0	20500.0
3602. pbz+phch2=pbzjB+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
3603. pbz+phch2=pbzjC+toluen	7.94E+11	0.0	16200.0
3604. pbz+Bphc2h4=pbzjA+phc2h5	7.94E+11	0.0	2050.0
3605. pbz+Bphc2h4=pbzjB+phc2h5	7.94E+11	0.0	1620.0
3606. pbz+Bphc2h4=pbzjC+phc2h5	7.94E+11	0.0	1620.0
3607. pbz+ch3o=pbzjA+ch3oh	3.18E+11	0.0	7050.0
3608. pbz+ch3o=pbzjB+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
3609. pbz+ch3o=pbzjC+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
3610. pbzjB=BPHPROPY	2.00E+11	0.0	20000.0
3611. pbzjA=phch2+c2h4	2.00E+13	0.0	12836.0
3612. pbzjB=c6h5+c3h6	2.00E+13	0.0	35390.0
3613. pbzjC=styren+ch3	1.00E+14	0.0	34860.0
3614. BPHPROPY=styren+ch3	2.00E+13	0.0	30000.0
3615. pbzjB+o=phch2+ch3hco	1.60E+13	0.0	0.0
3616. pbzjB+oh=toluen+ch3hco	1.60E+13	0.0	0.0
3617. pbzjB+ho2=>phch2+ch3hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3618. pbzjC+o=phhco+c2h5	1.60E+13	0.0	0.0
3619. pbzjC+oh=phhco+c2h6	1.60E+13	0.0	0.0
3620. pbzjC+ho2=>phhco+c2h5+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3621. pbzjA+o2=phc3h5-1+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3622. pbzjB+o2=phc3h5-1+ho2	6.90E+11	0.0	5000.0
3623. pbzjB+o2=phc3h5-2+ho2	2.60E+11	0.0	2500.0
3624. pbzjC+o2=phc3h5-2+ho2	1.58E+12	0.0	15200.0
3625. phc3h5-1=phch2+c2h3	8.00E+15	0.0	88500.0
3626. phc3h5-1=phc3h4+h	1.40E+15	0.0	86250.0
3627. phc3h5-1+h=phc3h4+h2	2.63E+14	0.0	8820.0
3628. phc3h5-1+o=phc3h4+oh	4.00E+11	0.7	-2100.0
3629. phc3h5-1+oh=phc3h4+h2o	3.12E+06	2.0	-1300.0
3630. phc3h5-1+ho2=phc3h4+h2o2	2.66E+11	0.0	11270.0
3631. phc3h5-1+o2=phc3h4+ho2	1.95E+12	0.0	38000.0
3632. phc3h5-1+ch3=phc3h4+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
3633. phc3h5-1+c6h5=phc3h4+c6h6	2.80E+12	0.0	11220.0
3634. phc3h5-1+phch2=phc3h4+toluen	2.80E+12	0.0	11220.0
3635. phc3h5-1+Aphc2h4=phc3h4+phc2h5	2.80E+12	0.0	11220.0
3636. phc3h5-1+h=c6h6+ac3h5	2.40E+13	0.0	5123.0
3637. phc3h5-1+ho2=>Aphc2h4+hco+oh	2.50E+12	1.0	25000.0
3638. phc3h5-1+ho2=>phch2co+ch3+oh	2.50E+12	1.0	25000.0
3639. phc3h5-1+o=styren+ch2o	7.02E+07	1.6	-1628.0
3640. phc3h5-1+o=phhco+c2h4	4.69E+07	1.6	-1628.0
3641. phc3h5-1+oh=>Aphc2h4+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
3642. phc3h5-1+oh=>phch2hco+ch3	1.00E+12	0.0	0.0
3643. phc3h5-2=ASTYRYL+ch3	3.00E+17	0.0	99000.0
3644. phc3h5-2=c6h5+sc3h5	8.00E+15	0.0	163800.0
3645. phc3h5-2=phc3h4+h	2.10E+15	0.0	88230.0
3646. phc3h5-2+h=phc3h4+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
3647. phc3h5-2+o=phc3h4+oh	1.75E+11	0.7	5884.0
3648. phc3h5-2+oh=phc3h4+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
3649. phc3h5-2+ho2=phc3h4+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
3650. phc3h5-2+o2=phc3h4+ho2	1.95E+12	0.0	39000.0
3651. phc3h5-2+ch3=phc3h4+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
3652. phc3h5-2+c6h5=phc3h4+c6h6	2.80E+12	0.0	11220.0
3653. phc3h5-2+phch2=phc3h4+toluen	2.80E+12	0.0	11220.0
3654. phc3h5-2+Aphc2h4=phc3h4+phc2h5	2.80E+12	0.0	11220.0
3655. phc3h5-2+o=phhco+c2h4	7.00E+07	1.6	-628.0
3656. phc3h5-2+o=styren+ch2o	4.70E+07	1.6	-628.0
3657. phc3h5-2+oh=>phhco+c2h5	2.60E+13	0.0	0.0
3658. phc3h5-2+oh=>phch2+ch3hco	2.60E+13	0.0	0.0
3659. phc3h5-2+oh=Cphc3h5ohB	4.75E+12	0.0	-782.0
3660. phc3h5-2+oh=Bphc3h5ohC	4.75E+12	0.0	-782.0
3661. phc3h4+ho2=Cophc3h4-1+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
3662. phc3h4+ho2=Aophc3h4-2+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
3663. phc3h4+ch3o2=Cophc3h4-1+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3664. phc3h4+ch3o2=Aophc3h4-2+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3665. phc3h4+c2h5o2=Cophc3h4-1+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3666. phc3h4+c2h5o2=Aophc3h4-2+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3667. phc3h4+nc3h7o2=Cophc3h4-1+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3668. phc3h4+nc3h7o2=Aophc3h4-2+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3669. phc3h4+ic3h7o2=Cophc3h4-1+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3670. phc3h4+ic3h7o2=Aophc3h4-2+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
3671. phc3h4+o2=phhco+ch2hco	1.06E+10	0.3	12838.0
3672. Cophc3h4-1=phhco+c2h3	7.94E+14	0.0	19000.0
3673. Aophc3h4-2=ch2o+ASTYRYL	7.94E+14	0.0	19000.0
3674. Cphc3h5ohB+o2=pbzohBqjC	4.58E+11	0.0	-378.0
3675. Bphc3h5ohC+o2=pbzohCqjB	2.00E+12	0.0	0.0
3676. Bphc3h5ohA+o2=pbzohAqjB	2.00E+12	0.0	0.0
3677. Aphc3h5ohB+o2=pbzohBqjA	2.00E+12	0.0	0.0
3678. pbzohBqjC=phhco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
3679. pbzohCqjB=phhco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
3680. pbzohAqjB=phch2hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
3681. pbzohBqjA=phch2hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
3682. phc2h4hco+o2=>phc2h4co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
3683. phc2h4hco+ho2=>phc2h4co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
3684. phc2h4hco+oh=>phc2h4co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
3685. phc2h4hco+o=>phc2h4co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
3686. phc2h4hco+h=>phc2h4co+h2	5.54E+02	3.5	5167.0
3687. phc2h4hco+ch3=>phc2h4co+ch4	2.25E+00	4.0	8285.0
3688. phc2h4hco=>Aphc2h4+hco	5.00E+16	0.0	72250.0
3689. phc2h4co=Aphc2h4+co	8.00E+13	0.0	30000.0
3690. phc2h4co+ho2=>Aphc2h4+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
3691. phch2coch2=phch2+ch2co	4.00E+13	0.0	13500.0
3692. phcoc2h4=phco+c2h4	4.00E+13	0.0	27870.0
3693. phcoc2h4+o2=phcoc2h3+ho2	5.00E+12	0.0	5000.0
3694. phcoc2h3=>phco+c2h3	1.22E+23	-2.0	83950.0
3695. phcoc2h3=>c6h5+c2h3co	1.22E+23	-2.0	83950.0
3696. phch2+phch2=c14h14	2.51E+11	0.4	0.0
3697. c5h5+c5h5=napht+h2	1.00E+13	0.0	7000.0
3698. c5h5+c5h5=napht+h+h	2.00E+13	0.0	4000.0
3699. A1c2h3AC=napht+h	1.00E+10	0.0	4780.1
3700. phch2+c3h3=c10h10	1.00E+10	0.0	0.0
3701. napht+h=c10h9	5.00E+14	0.0	5000.0
3702. napht=A2-X+h	4.50E+15	0.0	107433.1
3703. napht+h=A2-X+h2	2.50E+14	0.0	15999.0
3704. napht+oh=A2-X+h2o	1.63E+08	1.4	1450.8
3705. napht+ch3=A2-X+ch4	2.00E+12	0.0	15060.0
3706. napht+o=A2O+h	2.23E+13	0.0	4530.7
3707. napht+o=A2-X+oh	2.00E+13	0.0	14704.0
3708. napht+o2=A2-X+ho2	6.30E+13	0.0	60000.0
3709. A2-X+ho2=A2O+oh	5.00E+13	0.0	999.0
3710. A2-X+o2=A2O+o	2.09E+12	0.0	7468.9
3711. A2-X+oh=A2O+h	5.00E+13	0.0	0.0
3712. A2O+h=A2oh	5.06E+14	0.0	0.0
3713. A2O=>indenyl+co	7.40E+11	0.0	43853.0
3714. A2oh+oh=A2O+h2o	3.00E+13	0.0	0.0
3715. A2oh+h=A2O+h2	1.15E+14	0.0	12399.6
3716. A2oh+h=napht+oh	2.23E+13	0.0	7927.8
3717. A2oh+o=A2O+oh	1.26E+13	0.0	2899.1
3718. c10h10+oh=c10h9+h2o	5.00E+06	2.0	0.0
3719. c10h10+o=c10h9+oh	7.00E+11	0.7	6000.0
3720. c10h10+h=c10h9+h2	2.00E+05	2.5	2500.0
3721. c10h9+h=c10h10	1.00E+14	0.0	0.0
3722. c6h4c2h3+c2h2=A1c2h3AC	5.00E+12	0.0	0.0
3723. pch=c2h5+mchA	6.50E+16	0.0	84000.0
3724. pch=ch3+echA	6.50E+16	0.0	85000.0
3725. pch=nc3h7+cyc6h11	6.50E+16	0.0	84000.0
3726. pch=>c2h4+c2h4+c5h10	1.30E+17	0.0	84000.0
3727. pch=>c2h4+nc3h7+Dc4h7-1	1.30E+17	0.0	84000.0
3728. pch=>3c2h4+c3h6	1.30E+17	0.0	84000.0
3729. pch=pchA+h	9.00E+15	0.0	100220.0
3730. pch=pchB+h	6.00E+15	0.0	99120.0
3731. pch=pchC+h	6.00E+15	0.0	99120.0
3732. pch=pchD+h	3.00E+15	0.0	99520.0
3733. pch=pchE+h	6.00E+15	0.0	99520.0
3734. pch=pchF+h	6.00E+15	0.0	99520.0
3735. pch=pchG+h	6.00E+15	0.0	99520.0
3736. pch+o2=pchA+ho2	2.10E+13	0.0	50610.0
3737. pch+o2=pchB+ho2	1.40E+13	0.0	49510.0
3738. pch+o2=pchC+ho2	1.40E+13	0.0	49510.0
3739. pch+o2=pchD+ho2	7.00E+11	0.0	49910.0
3740. pch+o2=pchE+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0
3741. pch+o2=pchF+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0
3742. pch+o2=pchG+ho2	1.40E+13	0.0	49910.0
3743. pch+oh=pchA+h2o	3.16E+07	1.8	934.0
3744. pch+oh=pchB+h2o	3.00E+09	1.0	260.0
3745. pch+oh=pchC+h2o	3.00E+09	1.0	260.0
3746. pch+oh=pchD+h2o	5.50E+12	0.0	790.0
3747. pch+oh=pchE+h2o	1.10E+13	0.0	790.0
3748. pch+oh=pchF+h2o	1.10E+13	0.0	790.0
3749. pch+oh=pchG+h2o	5.50E+12	0.0	790.0
3750. pch+ho2=pchA+h2o2	2.38E+04	2.5	16494.0

3751. pch+ho2=pchB+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
3752. pch+ho2=pchC+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
3753. pch+ho2=pchD+h2o2	3.61E+03	2.5	10532.0
3754. pch+ho2=pchE+h2o2	1.93E+04	2.6	13910.0
3755. pch+ho2=pchF+h2o2	1.93E+04	2.6	13910.0
3756. pch+ho2=pchG+h2o2	9.64E+03	2.6	13910.0
3757. pch+h=pchA+h2	6.68E+05	2.5	6756.0
3758. pch+h=pchB+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
3759. pch+h=pchC+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
3760. pch+h=pchD+h2	6.02E+05	2.4	2583.0
3761. pch+h=pchE+h2	2.60E+06	2.4	4471.0
3762. pch+h=pchF+h2	2.60E+06	2.4	4471.0
3763. pch+h=pchG+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
3764. pch+o=pchA+oh	1.88E+06	2.4	5505.0
3765. pch+o=pchB+oh	5.50E+05	2.5	3140.0
3766. pch+o=pchC+oh	5.50E+05	2.5	3140.0
3767. pch+o=pchD+oh	3.83E+05	2.4	1140.0
3768. pch+o=pchE+oh	1.10E+06	2.5	2830.0
3769. pch+o=pchF+oh	1.10E+06	2.5	2830.0
3770. pch+o=pchG+oh	5.51E+05	2.5	2830.0
3771. pch+ch3=pchA+ch4	1.50E+12	0.0	11710.0
3772. pch+ch3=pchB+ch4	8.07E+11	0.0	10110.0
3773. pch+ch3=pchC+ch4	8.07E+11	0.0	10110.0
3774. pch+ch3=pchD+ch4	6.01E-10	6.4	893.0
3775. pch+ch3=pchE+ch4	3.02E+00	3.5	5481.0
3776. pch+ch3=pchF+ch4	3.02E+00	3.5	5481.0
3777. pch+ch3=pchG+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
3778. pch+c2h5=pchA+c2h6	4.52E-01	3.6	9141.0
3779. pch+c2h5=pchB+c2h6	1.21E+00	3.5	7472.0
3780. pch+c2h5=pchC+c2h6	1.21E+00	3.5	7472.0
3781. pch+c2h5=pchD+c2h6	6.01E-10	6.4	893.0
3782. pch+c2h5=pchE+c2h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3783. pch+c2h5=pchF+c2h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3784. pch+c2h5=pchG+c2h6	1.51E+00	3.5	5481.0
3785. pch+c2h3=pchA+c2h4	3.00E+02	3.3	10502.0
3786. pch+c2h3=pchB+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
3787. pch+c2h3=pchC+c2h4	1.00E+03	3.1	8829.0
3788. pch+c2h3=pchD+c2h4	6.01E-10	6.4	893.0
3789. pch+c2h3=pchE+c2h4	3.02E+00	3.5	5481.0
3790. pch+c2h3=pchF+c2h4	3.02E+00	3.5	5481.0
3791. pch+c2h3=pchG+c2h4	1.51E+00	3.5	5481.0
3792. pch+ac3h5=pchA+c3h6	2.18E+02	3.3	19852.0
3793. pch+ac3h5=pchB+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
3794. pch+ac3h5=pchC+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
3795. pch+ac3h5=pchD+c3h6	6.01E-10	6.4	893.0
3796. pch+ac3h5=pchE+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3797. pch+ac3h5=pchF+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3798. pch+ac3h5=pchG+c3h6	1.51E+00	3.5	5481.0
3799. pch+sc3h5=pchA+c3h6	2.18E+02	3.3	19852.0
3800. pch+sc3h5=pchB+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
3801. pch+sc3h5=pchC+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
3802. pch+sc3h5=pchD+c3h6	6.01E-10	6.4	893.0
3803. pch+sc3h5=pchE+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3804. pch+sc3h5=pchF+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3805. pch+sc3h5=pchG+c3h6	1.51E+00	3.5	5481.0
3806. pch+tc3h5=pchA+c3h6	2.18E+02	3.3	19852.0
3807. pch+tc3h5=pchB+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
3808. pch+tc3h5=pchC+c3h6	7.87E+01	3.3	18163.0
3809. pch+tc3h5=pchD+c3h6	6.01E-10	6.4	893.0
3810. pch+tc3h5=pchE+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3811. pch+tc3h5=pchF+c3h6	3.02E+00	3.5	5481.0
3812. pch+tc3h5=pchG+c3h6	1.51E+00	3.5	5481.0
3813. pch+hco=pchA+ch2o	1.02E+05	2.5	18441.0
3814. pch+hco=pchB+ch2o	1.08E+07	1.9	17010.0
3815. pch+hco=pchC+ch2o	1.08E+07	1.9	17010.0
3816. pch+hco=pchD+ch2o	2.25E+11	0.0	9540.0
3817. pch+hco=pchE+ch2o	4.50E+11	0.0	9540.0
3818. pch+hco=pchF+ch2o	4.50E+11	0.0	9540.0
3819. pch+hco=pchG+ch2o	2.25E+11	0.0	9540.0
3820. pch+ch3o=pchA+ch3oh	1.59E+11	0.0	7050.0
3821. pch+ch3o=pchB+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
3822. pch+ch3o=pchC+ch3oh	7.20E+10	0.0	4470.0
3823. pch+ch3o=pchD+ch3oh	2.29E+10	0.0	2873.0
3824. pch+ch3o=pchE+ch3oh	2.90E+11	0.0	4571.0
3825. pch+ch3o=pchF+ch3oh	2.90E+11	0.0	4571.0
3826. pch+ch3o=pchG+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
3827. pch+Dc4h7-1=pchA+c4h8	4.52E-01	3.6	9141.0
3828. pch+Dc4h7-1=pchB+c4h8	1.21E+00	3.5	7472.0
3829. pch+Dc4h7-1=pchC+c4h8	1.21E+00	3.5	7472.0
3830. pch+Dc4h7-1=pchD+c4h8	6.01E-10	6.4	893.0
3831. pch+Dc4h7-1=pchE+c4h8	3.02E+00	3.5	5481.0
3832. pch+Dc4h7-1=pchF+c4h8	3.02E+00	3.5	5481.0
3833. pch+Dc4h7-1=pchG+c4h8	1.51E+00	3.5	5481.0
3834. pchA=mchA+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
3835. pchB=cyc6h11+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
3836. pchC=eche1+ch3	2.00E+13	0.0	31000.0
3837. pchC=>c2h4+c2h4+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	28700.0
3838. pchD=c2h5+mche1	2.00E+13	0.0	28700.0
3839. pchD=>c2h4+p2c4h614	2.00E+13	0.0	28700.0
3840. pchE=cyc6h10+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700.0
3841. pchE=>c2h4+Ac7h13-3	2.00E+13	0.0	28700.0
3842. pchE=>c2h4+c4h6+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700.0
3843. pchF=>c5h10+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	28700.0
3844. pchF=>c2h5+c7h12-16	2.00E+13	0.0	28700.0
3845. pchF=>c2h4+Dc7h13-1	2.00E+13	0.0	28700.0
3846. pchG=>c5h10+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	28700.0
3847. pchG=>nc3h7+c6h10-15	2.00E+13	0.0	28700.0
3848. pchA=pche1+h	2.40E+13	0.0	36450.0
3849. pchB=pche1+h	3.60E+13	0.0	36050.0
3850. pchB=pche2+h	2.40E+13	0.0	33250.0
3851. pchC=pche2+h	2.40E+13	0.0	33250.0
3852. pchC=pche3+h	1.20E+13	0.0	30370.0
3853. pchD=pche3+h	2.40E+13	0.0	29970.0
3854. pchD=pche4+h	4.80E+13	0.0	31690.0
3855. pchE=pche4+h	1.20E+13	0.0	31690.0
3856. pchE=pche5+h	2.40E+13	0.0	32625.0
3857. pchF=pche5+h	2.40E+13	0.0	32625.0
3858. pchF=pche6+h	2.40E+13	0.0	32965.0
3859. pchG=pche6+h	4.80E+13	0.0	32965.0
3860. pchA+o2=pche1+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3861. pchB+o2=pche1+ho2	6.90E+11	0.0	5000.0
3862. pchB+o2=pche2+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3863. pchC+o2=pche2+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3864. pchC+o2=pche3+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0
3865. pchD+o2=pche3+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3866. pchD+o2=pche4+ho2	3.16E+12	0.0	5000.0
3867. pchE+o2=pche4+ho2	4.50E+11	0.0	5000.0
3868. pchE+o2=pche5+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3869. pchF+o2=pche5+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3870. pchF+o2=pche6+ho2	1.58E+12	0.0	5000.0
3871. pchG+o2=pche6+ho2	3.16E+12	0.0	5000.0
3872. pchA+o=ch2o+echA	2.00E+13	0.0	4000.0
3873. pchB+o=ch3hco+mchA	2.00E+13	0.0	4000.0
3874. pchB+o=ch3+echoA	2.00E+13	0.0	4000.0
3875. pchC+o=ethco+cyc6h11	2.00E+13	0.0	4000.0
3876. pchC+o=c2h5+mchoA	2.00E+13	0.0	4000.0
3877. pchD+o=nc3h7+chxone	2.00E+13	0.0	4000.0
3878. pchE+o=>c5h10+c2h4+ch2hco	2.00E+13	0.0	4000.0
3879. pchE+o=>2c2h4+c2h5+acrol	2.00E+13	0.0	4000.0
3880. pchF+o=>c5h10+c2h4+ch2hco	2.00E+13	0.0	4000.0
3881. pchF+o=>ac3h5hco+c2h4+nc3h7	2.00E+13	0.0	4000.0
3882. pchG+o=>c5h10+c2h4+ch2hco	2.00E+13	0.0	4000.0
3883. pchA+oh=ch2o+ech	2.00E+13	0.0	4000.0
3884. pchB+oh=ch3hco+mch	2.00E+13	0.0	4000.0
3885. pchB+oh=ch4+echoA	2.00E+13	0.0	4000.0
3886. pchC+oh=ethco+cyc6h12	2.00E+13	0.0	4000.0
3887. pchC+oh=c2h6+mchoA	2.00E+13	0.0	4000.0
3888. pchD+oh=c3h8+chxone	2.00E+13	0.0	4000.0
3889. pchE+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
3890. pchE+oh=>2c2h4+c2h6+acrol	2.00E+13	0.0	4000.0
3891. pchF+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
3892. pchF+oh=>ac3h5hco+c2h4+c3h8	2.00E+13	0.0	4000.0
3893. pchG+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco	2.00E+13	0.0	4000.0
3894. pchA+ho2=>ch2o+echA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3895. pchB+ho2=>ch3hco+mchA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3896. pchB+ho2=>ch3+echoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3897. pchC+ho2=>ethco+cyc6h11+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3898. pchC+ho2=>c2h5+mchoA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3899. pchD+ho2=>nc3h7+chxone+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3900. pchE+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3901. pchE+ho2=>2c2h4+c2h5+acrol+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3902. pchF+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3903. pchF+ho2=>ac3h5hco+c2h4+nc3h7+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3904. pchG+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
3905. pchE=pchB	4.00E+11	0.0	16100.0
3906. pchG=pchB	2.00E+11	0.0	18100.0
3907. pchD=pchA	6.20E+09	0.6	26190.0
3908. pchE=pchA	4.00E+11	0.0	11100.0
3909. pchF=pchA	4.00E+11	0.0	18100.0
3910. pchF=pchC	4.00E+11	0.0	18100.0
3911. pchG=pchC	4.00E+11	0.0	11100.0
3912. pchA+o2=pchqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
3913. pchB+o2=pchqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
3914. pchC+o2=pchqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
3915. pchD+o2=pchqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
3916. pchE+o2=pchqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
3917. pchF+o2=pchqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
3918. pchG+o2=pchqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
3919. pchA+ho2=pchojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
3920. pchB+ho2=pchojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
3921. pchC+ho2=pchojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
3922. pchD+ho2=pchojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
3923. pchE+ho2=pchojE+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
3924. pchF+ho2=pchojF+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
3925. pchG+ho2=pchojG+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
3926. pchA+ch3o2=pchojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3927. pchB+ch3o2=pchojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3928. pchC+ch3o2=pchojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3929. pchD+ch3o2=pchojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3930. pchE+ch3o2=pchojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3931. pchF+ch3o2=pchojF+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3932. pchG+ch3o2=pchojG+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3933. pchA+c2h5o2=pchojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3934. pchB+c2h5o2=pchojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3935. pchC+c2h5o2=pchojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3936. pchD+c2h5o2=pchojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3937. pchE+c2h5o2=pchojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3938. pchF+c2h5o2=pchojF+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3939. pchG+c2h5o2=pchojG+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3940. pchA+nc3h7o2=pchojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3941. pchB+nc3h7o2=pchojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3942. pchC+nc3h7o2=pchojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3943. pchD+nc3h7o2=pchojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3944. pchE+nc3h7o2=pchojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3945. pchF+nc3h7o2=pchojF+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3946. pchG+nc3h7o2=pchojG+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
3947. pchA+pchqjA=2pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3948. pchB+pchqjA=pchojB+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3949. pchC+pchqjA=pchojC+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3950. pchD+pchqjA=pchojD+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3951. pchE+pchqjA=pchojE+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3952. pchF+pchqjA=pchojF+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3953. pchG+pchqjA=pchojG+pchojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
3954. pchA+pchqjB=pchojA+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3955. pchB+pchqjB=2pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3956. pchC+pchqjB=pchojC+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3957. pchD+pchqjB=pchojD+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3958. pchE+pchqjB=pchojE+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3959. pchF+pchqjB=pchojF+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3960. pchG+pchqjB=pchojG+pchojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
3961. pchA+pchqjC=pchojA+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3962. pchB+pchqjC=pchojB+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3963. pchC+pchqjC=2pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3964. pchD+pchqjC=pchojD+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3965. pchE+pchqjC=pchojE+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3966. pchF+pchqjC=pchojF+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3967. pchG+pchqjC=pchojG+pchojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
3968. pchA+pchqjD=pchojA+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3969. pchB+pchqjD=pchojB+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3970. pchC+pchqjD=pchojC+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3971. pchD+pchqjD=2pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3972. pchE+pchqjD=pchojE+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3973. pchF+pchqjD=pchojF+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3974. pchG+pchqjD=pchojG+pchojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
3975. pchA+pchqjE=pchojA+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3976. pchB+pchqjE=pchojB+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3977. pchC+pchqjE=pchojC+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3978. pchD+pchqjE=pchojD+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0

3979.	pchE+pchqjE=2pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3980.	pchF+pchqjE=pchojF+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3981.	pchG+pchqjE=pchojG+pchojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
3982.	pchA+pchqjF=pchojA+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
3983.	pchB+pchqjF=pchojB+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
3984.	pchC+pchqjF=pchojC+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
3985.	pchD+pchqjF=pchojD+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
3986.	pchE+pchqjF=pchojE+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
3987.	pchF+pchqjF=2pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
3988.	pchG+pchqjF=pchojG+pchojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
3989.	pchA+pchqjG=pchojA+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
3990.	pchB+pchqjG=pchojB+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
3991.	pchC+pchqjG=pchojC+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
3992.	pchD+pchqjG=pchojD+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
3993.	pchE+pchqjG=pchojE+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
3994.	pchF+pchqjG=pchojF+pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
3995.	pchG+pchqjG=2pchojG	7.00E+12	0.0	-1000.0
3996.	pchojA=ch2o+echA	1.00E+15	0.0	21600.0
3997.	pchojB=ch3hco+mchA	7.94E+14	0.0	15300.0
3998.	pchojB=ch3+echoA	7.94E+14	0.0	15300.0
3999.	pchojC=ethco+cyc6h11	7.94E+14	0.0	15300.0
4000.	pchojC=c2h5+mchoA	7.94E+14	0.0	15300.0
4001.	pchojD=nc3h7+chxone	7.94E+14	0.0	15300.0
4002.	pchojG=EtDc7oArI	7.94E+14	0.0	15300.0
4003.	pchojF=EtDc7oIrA	7.94E+14	0.0	15300.0
4004.	pchojF=MeEc8oArI	7.94E+14	0.0	15300.0
4005.	pchojE=MeEc8oIrA	7.94E+14	0.0	15300.0
4006.	pchojE=Fc9oA	7.94E+14	0.0	15300.0
4007.	EtDc7oArI=c2h4+ch2hco+c5h10	2.00E+13	0.0	27750.0
4008.	EtDc7oArI=c2h4+c2h5+c4h7hco-1	2.00E+13	0.0	27750.0
4009.	EtDc7oArI+o2=EtDc7oAqjI	4.82E+36	-8.2	5167.0
4010.	EtDc7oAqjI=DEtDc7oAqI	2.88E+08	1.0	22000.0
4011.	DEtDc7oAqI+o2=EtDc7oAqIqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
4012.	EtDc7oAqIqjD=oh+EtDc7oAoIqD	2.88E+08	1.0	26000.0
4013.	EtDc7oAoIqD=oh+c6oAoC+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
4014.	EtDc7oAoIqD=oh+c7oAoD+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
4015.	EtDc7oIrA=c2h4+ch2hco+c5h10	2.00E+13	0.0	28140.0
4016.	EtDc7oIrA=c2h4+nc3h7+ac3h5hco	2.00E+13	0.0	36400.0
4017.	EtDc7oIrA+o2=EtDc7oIqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
4018.	EtDc7oIqjA=CEtDc7oIqA	5.75E+08	1.0	25000.0
4019.	EtDc7oIqjA=DEtDc7oIqA	4.94E+07	1.0	19000.0
4020.	CEtDc7oIqA+o2=EtDc7oIqAqjC	4.82E+36	-8.2	5167.0
4021.	DEtDc7oIqA+o2=EtDc7oIqAqjD	4.82E+36	-8.2	5167.0
4022.	EtDc7oIqAqjC=oh+EtDc7oAoIqC	5.75E+08	1.0	26000.0
4023.	EtDc7oIqAqjD=oh+EtDc7oAoIqD	9.89E+07	1.0	23000.0
4024.	EtDc7oAoIqC=oh+hcoch2hco+Cc6oA	1.00E+16	0.0	43000.0
4025.	EtDc7oAoIqC=oh+ch2hco+MeCc6oAoG	1.00E+16	0.0	43000.0
4026.	MeEc8oArI=c3h6cho-1+c5h10	2.00E+13	0.0	29200.0
4027.	MeEc8oArI=c6e5oA+nc3h7	2.00E+13	0.0	33750.0
4028.	MeEc8oArI+o2=MeEc8oAqjI	1.84E+45	-11.1	6538.0
4029.	MeEc8oAqjI=DMeEc8oAqI	5.75E+08	1.0	25000.0
4030.	MeEc8oAqjI=FMeEc8oAqI	5.75E+08	1.0	25000.0
4031.	DMeEc8oAqI+o2=MeEc8oAqIqjD	4.82E+36	-8.2	5167.0
4032.	FMeEc8oAqI+o2=MeEc8oAqIqjF	4.82E+36	-8.2	5167.0
4033.	MeEc8oAqIqjD=oh+MeEc8oAoIqD	5.75E+08	1.0	26000.0
4034.	MeEc8oAqIqjF=oh+MeEc8oAoIqF	5.75E+08	1.0	26000.0
4035.	MeEc8oAoIqD=oh+ch2ch2hco+MeBc5oAoF	1.00E+16	0.0	43000.0
4036.	MeEc8oAoIqD=oh+chcoch2ch2cho+acrol+c2h5	1.00E+16	0.0	43000.0
4037.	MeEc8oAoIqF=oh+ethco+Bc6oAoF	1.00E+16	0.0	43000.0
4038.	acrol+ch2ch2hco=Bc6oAoF	1.50E+11	0.0	7200.0
4039.	MeCc6oAoG+oh=>h2o+MeCc6oyAoG	4.20E+12	0.0	500.0
4040.	MeCc6oAoG+h=>h2+MeCc6oyAoG	4.00E+13	0.0	4200.0
4041.	MeCc6oAoG+ho2=>h2o2+MeCc6oyAoG	1.00E+12	0.0	10000.0
4042.	MeCc6oyAoG=>co+acrol+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700.0
4043.	MeCc6oyAoG+ho2=>oh+co2+acrol+nc3h7	2.00E+13	0.0	0.0
4044.	MeCc6oAoG+oh=>h2o+MeCc6oAoyG	4.20E+12	0.0	500.0
4045.	MeCc6oAoG+h=>h2+MeCc6oAoyG	4.00E+13	0.0	4200.0
4046.	MeCc6oAoG+ho2=>h2o2+MeCc6oAoyG	1.00E+12	0.0	10000.0
4047.	MeCc6oAoyG=>co+Cc6oA	2.00E+13	0.0	28700.0
4048.	MeCc6oAoyG+ho2=>oh+co2+Cc6oA	2.00E+13	0.0	0.0
4049.	MeEc8oIrA=>2c2h4+c2h5+acrol	2.00E+13	0.0	29440.0
4050.	MeEc8oIrA+o2=MeEc8oIqjA	1.84E+45	-11.1	6538.0
4051.	MeEc8oIqjA=CMeEc8oIqA	5.75E+08	1.0	25000.0
4052.	MeEc8oIqjA=DMeEc8oIqA	9.89E+07	1.0	22000.0
4053.	CMeEc8oIqA+o2=MeEc8oIqAqjC	4.82E+36	-8.2	5167.0
4054.	DMeEc8oIqA+o2=MeEc8oIqAqjD	4.82E+36	-8.2	5167.0
4055.	MeEc8oIqAqjC=oh+MeEc8oAoIqC	5.75E+08	1.0	26000.0
4056.	MeEc8oIqAqjD=oh+MeEc8oAoIqD	9.89E+07	1.0	23000.0
4057.	MeEc8oAoIqC=oh+ch2hco+MeCc6oAoG	1.00E+16	0.0	43000.0
4058.	MeEc8oAoIqC=oh+hcoch2hco+MeBc5oArF	1.00E+16	0.0	43000.0
4059.	Fc9oA=c5h10+c3h6cho-1	2.00E+13	0.0	29650.0
4060.	Fc9oA=c2h5+c7e6oA	2.00E+13	0.0	28210.0
4061.	Fc9oA+o2=c9oAqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
4062.	c9oAqjF=Cc9oAqF	9.89E+07	1.0	22000.0
4063.	c9oAqjF=Dc9oAqF	5.75E+08	1.0	25000.0
4064.	c9oAqjF=Hc9oAqF	5.75E+08	1.0	25000.0
4065.	Cc9oAqF+o2=c9oAqFqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
4066.	Dc9oAqF+o2=c9oAqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
4067.	Hc9oAqF+o2=c9oAqFqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
4068.	c9oAqFqjC=oh+c9oAoFqC	4.94E+07	1.0	21000.0
4069.	c9oAqFqjD=oh+c9oAoFqD	2.88E+08	1.0	23000.0
4070.	c9oAqFqjH=oh+c9oAoFqH	2.88E+08	1.0	23000.0
4071.	c9oAoFqC=oh+ch2hco+c7oAoD	1.00E+16	0.0	43000.0
4072.	c9oAoFqC=oh+hcoch2hco+Ac6oC	1.00E+16	0.0	43000.0
4073.	c9oAoFqD=oh+chcoch2ch2cho+nc3h7coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
4074.	c9oAoFqD=oh+ch2ch2hco+c6oAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
4075.	c9oAoFqH=oh+ch3hco+Ac7oBoG	1.00E+16	0.0	43000.0
4076.	pchqjA=BpchqA	3.35E+09	1.0	32500.0
4077.	pchqjA=CpchqA	5.75E+08	1.0	23000.0
4078.	pchqjA=DpchqA	4.94E+07	1.0	19000.0
4079.	pchqjB=ApchqB	5.02E+09	1.0	35500.0
4080.	pchqjB=CpchqB	3.35E+09	1.0	32500.0
4081.	pchqjB=DpchqB	2.88E+08	1.0	22000.0
4082.	pchqjB=EpchqB	1.22E+08	1.0	22645.3
4083.	pchqjC=ApchqC	8.62E+08	1.0	28000.0
4084.	pchqjC=BpchqC	3.35E+09	1.0	32500.0
4085.	pchqjC=DpchqC	1.67E+09	1.0	29500.0
4086.	pchqjC=EpchqC	7.13E+08	1.0	25645.3
4087.	pchqjC=FpchqC	7.13E+08	1.0	25226.6
4088.	pchqjD=ApchqD	1.48E+08	1.0	25000.0
4089.	pchqjD=BpchqD	5.75E+08	1.0	25000.0
4090.	pchqjD=CpchqD	3.35E+09	1.0	32500.0
4091.	pchqjD=EpchqD	4.15E+09	1.0	33145.3
4092.	pchqjD=FpchqD	4.28E+09	1.0	28226.6
4093.	pchqjD=GpchqD	3.43E+08	1.0	27305.9
4094.	pchqjE=ApchqE	1.58E+07	1.0	24645.3
4095.	pchqjE=BpchqE	6.13E+07	1.0	22645.3
4096.	pchqjE=CpchqE	3.56E+08	1.0	25645.3
4097.	pchqjE=DpchqE	1.04E+09	1.0	30145.3
4098.	pchqjE=FpchqE	2.07E+09	1.0	33145.3
4099.	pchqjE=GpchqE	2.14E+09	1.0	28226.6
4100.	pchqjE=HpchqE	3.43E+08	1.0	27305.9
4101.	pchqjE=IpchqE	2.14E+09	1.0	28226.6
4102.	pchqjF=ApchqF	1.63E+07	1.0	26226.6
4103.	pchqjF=BpchqF	6.32E+07	1.0	24226.6
4104.	pchqjF=CpchqF	3.68E+08	1.0	25226.6
4105.	pchqjF=DpchqF	1.07E+09	1.0	25226.6
4106.	pchqjF=EpchqF	2.08E+09	1.0	33145.3
4107.	pchqjF=GpchqF	2.08E+09	1.0	33145.3
4108.	pchqjF=HpchqF	2.14E+09	1.0	28226.6
4109.	pchqjF=IpchqF	3.43E+08	1.0	27305.9
4110.	pchqjG=DpchqG	1.72E+08	1.0	24305.9
4111.	pchqjG=EpchqG	4.28E+09	1.0	28226.6
4112.	pchqjG=FpchqG	4.15E+09	1.0	33145.3
4113.	pchqjA+ho2=pchqA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
4114.	pchqjB+ho2=pchqB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
4115.	pchqjC+ho2=pchqC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
4116.	pchqjD+ho2=pchqD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
4117.	pchqjE+ho2=pchqB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
4118.	pchqjF+ho2=pchqF+o2	1.00E+11	0.0	0.0
4119.	pchqjG+ho2=pchqG+o2	1.00E+11	0.0	0.0
4120.	pchqjA+h2o2=pchqA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
4121.	pchqjB+h2o2=pchqB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
4122.	pchqjC+h2o2=pchqC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
4123.	pchqjD+h2o2=pchqD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
4124.	pchqjE+h2o2=pchqE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
4125.	pchqjF+h2o2=pchqF+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
4126.	pchqjG+h2o2=pchqG+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
4127.	pchqjA+h2=pchqA+h	3.01E+13	0.0	26030.0
4128.	pchqjB+h2=pchqB+h	3.01E+13	0.0	26030.0
4129.	pchqjC+h2=pchqC+h	3.01E+13	0.0	26030.0
4130.	pchqjD+h2=pchqD+h	3.01E+13	0.0	26030.0
4131.	pchqjE+h2=pchqE+h	3.01E+13	0.0	26030.0
4132.	pchqjF+h2=pchqF+h	3.01E+13	0.0	26030.0
4133.	pchqjG+h2=pchqG+h	3.01E+13	0.0	26030.0
4134.	pchqjA+ch2o=pchqA+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
4135.	pchqjB+ch2o=pchqB+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
4136.	pchqjC+ch2o=pchqC+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
4137.	pchqjD+ch2o=pchqD+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
4138.	pchqjE+ch2o=pchqE+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
4139.	pchqjF+ch2o=pchqF+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
4140.	pchqjG+ch2o=pchqG+hco	5.60E+12	0.0	13600.0
4141.	pchqjA+ch3hco=pchqA+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4142.	pchqjB+ch3hco=pchqB+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4143.	pchqjC+ch3hco=pchqC+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4144.	pchqjD+ch3hco=pchqD+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4145.	pchqjE+ch3hco=pchqE+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4146.	pchqjF+ch3hco=pchqF+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4147.	pchqjG+ch3hco=pchqG+ch3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4148.	pchqjA+c2h6=pchqA+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
4149.	pchqjB+c2h6=pchqB+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
4150.	pchqjC+c2h6=pchqC+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
4151.	pchqjD+c2h6=pchqD+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
4152.	pchqjE+c2h6=pchqE+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
4153.	pchqjF+c2h6=pchqF+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
4154.	pchqjG+c2h6=pchqG+c2h5	1.70E+13	0.0	20460.0
4155.	pchqjA+c2h4=pchqA+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
4156.	pchqjB+c2h4=pchqB+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
4157.	pchqjC+c2h4=pchqC+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
4158.	pchqjD+c2h4=pchqD+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
4159.	pchqjE+c2h4=pchqE+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
4160.	pchqjF+c2h4=pchqF+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
4161.	pchqjG+c2h4=pchqG+c2h3	1.13E+13	0.0	30430.0
4162.	pchqjA+ethco=pchqA+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
4163.	pchqjB+ethco=pchqB+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
4164.	pchqjC+ethco=pchqC+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
4165.	pchqjD+ethco=pchqD+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
4166.	pchqjE+ethco=pchqE+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
4167.	pchqjF+ethco=pchqF+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
4168.	pchqjG+ethco=pchqG+c2h5co	2.00E+11	0.0	9500.0
4169.	pchqjA+acrol=pchqA+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4170.	pchqjB+acrol=pchqB+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4171.	pchqjC+acrol=pchqC+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4172.	pchqjD+acrol=pchqD+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4173.	pchqjE+acrol=pchqE+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4174.	pchqjF+acrol=pchqF+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4175.	pchqjG+acrol=pchqG+c2h3co	2.80E+12	0.0	13600.0
4176.	pchqjA+ch3oh=pchqA+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
4177.	pchqjB+ch3oh=pchqB+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
4178.	pchqjC+ch3oh=pchqC+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
4179.	pchqjD+ch3oh=pchqD+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
4180.	pchqjE+ch3oh=pchqE+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
4181.	pchqjF+ch3oh=pchqF+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
4182.	pchqjG+ch3oh=pchqG+ch3o	6.30E+12	0.0	19360.0
4183.	pchqjA+c3h6=pchqA+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
4184.	pchqjB+c3h6=pchqB+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
4185.	pchqjC+c3h6=pchqC+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
4186.	pchqjD+c3h6=pchqD+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
4187.	pchqjE+c3h6=pchqE+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
4188.	pchqjF+c3h6=pchqF+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
4189.	pchqjG+c3h6=pchqG+ac3h5	3.24E+11	0.0	14900.0
4190.	pchqjA+ch4=pchqA+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
4191.	pchqjB+ch4=pchqB+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
4192.	pchqjC+ch4=pchqC+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
4193.	pchqjD+ch4=pchqD+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
4194.	pchqjE+ch4=pchqE+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
4195.	pchqjF+ch4=pchqF+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
4196.	pchqjG+ch4=pchqG+ch3	1.12E+13	0.0	24640.0
4197.	pchqjA+pch=pchqA+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
4198.	pchqjA+pch=pchqA+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
4199.	pchqjA+pch=pchqA+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
4200.	pchqjA+pch=pchqA+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
4201.	pchqjA+pch=pchqA+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
4202.	pchqjA+pch=pchqA+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
4203.	pchqjA+pch=pchqA+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
4204.	pchqjB+pch=pchqB+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
4205.	pchqjB+pch=pchqB+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
4206.	pchqjB+pch=pchqB+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0

4207. pchqjB+pch=pchqB+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
4208. pchqjB+pch=pchqB+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
4209. pchqjB+pch=pchqB+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
4210. pchqjB+pch=pchqB+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
4211. pchqjC+pch=pchqC+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
4212. pchqjC+pch=pchqC+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
4213. pchqjC+pch=pchqC+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
4214. pchqjC+pch=pchqC+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
4215. pchqjC+pch=pchqC+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
4216. pchqjC+pch=pchqC+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
4217. pchqjC+pch=pchqC+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
4218. pchqjD+pch=pchqD+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
4219. pchqjD+pch=pchqD+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
4220. pchqjD+pch=pchqD+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
4221. pchqjD+pch=pchqD+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
4222. pchqjD+pch=pchqD+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
4223. pchqjD+pch=pchqD+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
4224. pchqjD+pch=pchqD+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
4225. pchqjE+pch=pchqE+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
4226. pchqjE+pch=pchqE+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
4227. pchqjE+pch=pchqE+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
4228. pchqjE+pch=pchqE+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
4229. pchqjE+pch=pchqE+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
4230. pchqjE+pch=pchqE+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
4231. pchqjE+pch=pchqE+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
4232. pchqjF+pch=pchqF+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
4233. pchqjF+pch=pchqF+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
4234. pchqjF+pch=pchqF+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
4235. pchqjF+pch=pchqF+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
4236. pchqjF+pch=pchqF+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
4237. pchqjF+pch=pchqF+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
4238. pchqjF+pch=pchqF+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
4239. pchqjG+pch=pchqG+pchA	6.05E+12	0.0	20430.0
4240. pchqjG+pch=pchqG+pchB	4.03E+12	0.0	17700.0
4241. pchqjG+pch=pchqG+pchC	4.03E+12	0.0	17700.0
4242. pchqjG+pch=pchqG+pchD	2.02E+12	0.0	16000.0
4243. pchqjG+pch=pchqG+pchE	8.06E+12	0.0	17700.0
4244. pchqjG+pch=pchqG+pchF	8.06E+12	0.0	17700.0
4245. pchqjG+pch=pchqG+pchG	4.03E+12	0.0	17700.0
4246. pchqjB+ch3=pchojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4247. pchqjA+ch3=pchojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4248. pchqjC+ch3=pchojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4249. pchqjD+ch3=pchojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4250. pchqjE+ch3=pchojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4251. pchqjF+ch3=pchojF+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4252. pchqjG+ch3=pchojG+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4253. pchqjA+c2h5=pchojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4254. pchqjB+c2h5=pchojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4255. pchqjC+c2h5=pchojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4256. pchqjD+c2h5=pchojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4257. pchqjE+c2h5=pchojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4258. pchqjF+c2h5=pchojF+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4259. pchqjG+c2h5=pchojG+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4260. pchqjA+nc3h7=pchojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4261. pchqjB+nc3h7=pchojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4262. pchqjC+nc3h7=pchojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4263. pchqjD+nc3h7=pchojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4264. pchqjE+nc3h7=pchojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4265. pchqjF+nc3h7=pchojF+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4266. pchqjG+nc3h7=pchojG+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4267. pchqjA+ic3h7=pchojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4268. pchqjB+ic3h7=pchojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4269. pchqjC+ic3h7=pchojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4270. pchqjD+ic3h7=pchojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4271. pchqjE+ic3h7=pchojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4272. pchqjF+ic3h7=pchojF+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4273. pchqjG+ic3h7=pchojG+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4274. pchqjA+ac3h5=pchojA+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4275. pchqjB+ac3h5=pchojB+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4276. pchqjC+ac3h5=pchojC+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4277. pchqjD+ac3h5=pchojD+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4278. pchqjE+ac3h5=pchojE+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4279. pchqjF+ac3h5=pchojF+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4280. pchqjG+ac3h5=pchojG+c3h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
4281. pchqjA+ho2=>pchojA+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
4282. pchqjB+ho2=>pchojB+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
4283. pchqjC+ho2=>pchojC+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
4284. pchqjD+ho2=>pchojD+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
4285. pchqjE+ho2=>pchojE+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
4286. pchqjF+ho2=>pchojF+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
4287. pchqjG+ho2=>pchojG+oh+o2	1.40E-14	-1.6	1860.0
4288. pchqjA+ch3o2=>pchojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4289. pchqjB+ch3o2=>pchojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4290. pchqjC+ch3o2=>pchojC+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4291. pchqjD+ch3o2=>pchojD+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4292. pchqjE+ch3o2=>pchojE+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4293. pchqjF+ch3o2=>pchojF+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4294. pchqjG+ch3o2=>pchojG+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4295. pchqjA+c2h5o2=>pchojA+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4296. pchqjB+c2h5o2=>pchojB+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4297. pchqjC+c2h5o2=>pchojC+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4298. pchqjD+c2h5o2=>pchojD+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4299. pchqjE+c2h5o2=>pchojE+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4300. pchqjF+c2h5o2=>pchojF+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4301. pchqjG+c2h5o2=>pchojG+c2h5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4302. pchqjA+nc3h7o2=>pchojA+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4303. pchqjB+nc3h7o2=>pchojB+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4304. pchqjC+nc3h7o2=>pchojC+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4305. pchqjD+nc3h7o2=>pchojD+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4306. pchqjE+nc3h7o2=>pchojE+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4307. pchqjF+nc3h7o2=>pchojF+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4308. pchqjG+nc3h7o2=>pchojG+nc3h7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4309. pchqjA+pchqjA=>pchojA+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4310. pchqjB+pchqjA=>pchojB+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4311. pchqjC+pchqjA=>pchojC+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4312. pchqjD+pchqjA=>pchojD+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4313. pchqjE+pchqjA=>pchojE+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4314. pchqjF+pchqjA=>pchojF+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4315. pchqjG+pchqjA=>pchojG+pchojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4316. pchqjB+pchqjB=>pchojB+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4317. pchqjC+pchqjB=>pchojC+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4318. pchqjD+pchqjB=>pchojD+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4319. pchqjE+pchqjB=>pchojE+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4320. pchqjF+pchqjB=>pchojF+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4321. pchqjG+pchqjB=>pchojG+pchojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4322. pchqjC+pchqjC=>pchojC+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4323. pchqjD+pchqjC=>pchojD+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4324. pchqjE+pchqjC=>pchojE+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4325. pchqjF+pchqjC=>pchojF+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4326. pchqjG+pchqjC=>pchojG+pchojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4327. pchqjD+pchqjD=>pchojD+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4328. pchqjE+pchqjD=>pchojE+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4329. pchqjF+pchqjD=>pchojF+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4330. pchqjG+pchqjD=>pchojG+pchojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4331. pchqjE+pchqjE=>pchojE+pchojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4332. pchqjF+pchqjE=>pchojF+pchojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4333. pchqjG+pchqjE=>pchojG+pchojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4334. pchqjF+pchqjF=>pchojF+pchojF+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4335. pchqjG+pchqjF=>pchojG+pchojF+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4336. pchqjG+pchqjG=>pchojG+pchojG+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
4337. pchojA+oh=pchqA	1.81E+13	0.0	0.0
4338. pchojB+oh=pchqB	1.81E+13	0.0	0.0
4339. pchojC+oh=pchqC	1.81E+13	0.0	0.0
4340. pchojD+oh=pchqD	1.81E+13	0.0	0.0
4341. pchojE+oh=pchqE	1.81E+13	0.0	0.0
4342. pchojF+oh=pchqF	1.81E+13	0.0	0.0
4343. pchojG+oh=pchqG	1.81E+13	0.0	0.0
4344. pche4=c2h4+p2c4h513	1.00E+15	0.0	66900.0
4345. pche5=c2h4+c7h12-13	1.00E+15	0.0	66900.0
4346. pche6=c5h10+c4h6	1.00E+15	0.0	66900.0
4347. pche1+ho2=ApchqB	1.00E+11	0.0	12500.0
4348. pche1+ho2=BpchqA	8.00E+10	0.0	6000.0
4349. pche2+ho2=BpchqC	8.00E+10	0.0	6000.0
4350. pche2+ho2=CpchqB	8.00E+10	0.0	6000.0
4351. pche3+ho2=CpchqD	8.00E+10	0.0	6000.0
4352. pche3+ho2=DpchqC	8.00E+10	0.0	6000.0
4353. pche4+ho2=DpchqE	8.00E+10	0.0	6000.0
4354. pche4+ho2=EpchqD	8.00E+10	0.0	6000.0
4355. pche5+ho2=EpchqF	8.00E+10	0.0	6000.0
4356. pche5+ho2=FpchqE	8.00E+10	0.0	6000.0
4357. pche6+ho2=FpchqG	8.00E+10	0.0	6000.0
4358. pche6+ho2=GpchqF	8.00E+10	0.0	6000.0
4359. pche1+ho2=pcho-AB+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
4360. pche2+ho2=pcho-BC+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
4361. pche3+ho2=pcho-CD+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
4362. pche4+ho2=pcho-DE+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
4363. pche5+ho2=pcho-EF+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
4364. pche6+ho2=pcho-FG+oh	1.00E+12	0.0	14400.0
4365. pche1+ch3o2=pcho-AB+ch3o	3.97E+11	0.0	11725.0
4366. pche2+ch3o2=pcho-BC+ch3o	3.98E+11	0.0	12620.0
4367. pche3+ch3o2=pcho-CD+ch3o	1.45E+11	0.0	10135.0
4368. pche4+ch3o2=pcho-DE+ch3o	1.45E+11	0.0	10135.0
4369. pche5+ch3o2=pcho-EF+ch3o	3.98E+11	0.0	12620.0
4370. pche6+ch3o2=pcho-FG+ch3o	3.98E+11	0.0	12620.0
4371. pche1+c2h5o2=pcho-AB+c2h5o	3.97E+11	0.0	11725.0
4372. pche2+c2h5o2=pcho-BC+c2h5o	3.98E+11	0.0	12620.0
4373. pche3+c2h5o2=pcho-CD+c2h5o	1.45E+11	0.0	10135.0
4374. pche4+c2h5o2=pcho-DE+c2h5o	1.45E+11	0.0	10135.0
4375. pche5+c2h5o2=pcho-EF+c2h5o	3.98E+11	0.0	12620.0
4376. pche6+c2h5o2=pcho-FG+c2h5o	3.98E+11	0.0	12620.0
4377. pche1+nc3h7o2=pcho-AB+nc3h7o	3.97E+11	0.0	11725.0
4378. pche2+nc3h7o2=pcho-BC+nc3h7o	3.98E+11	0.0	12620.0
4379. pche3+nc3h7o2=pcho-CD+nc3h7o	1.45E+11	0.0	10135.0
4380. pche4+nc3h7o2=pcho-DE+nc3h7o	1.45E+11	0.0	10135.0
4381. pche5+nc3h7o2=pcho-EF+nc3h7o	3.98E+11	0.0	12620.0
4382. pche6+nc3h7o2=pcho-FG+nc3h7o	3.98E+11	0.0	12620.0
4383. pche1+pchqjA=pcho-AB+pchojA	3.97E+11	0.0	11725.0
4384. pche2+pchqjA=pcho-BC+pchojA	3.98E+11	0.0	12620.0
4385. pche3+pchqjA=pcho-CD+pchojA	1.45E+11	0.0	10135.0
4386. pche4+pchqjA=pcho-DE+pchojA	1.45E+11	0.0	10135.0
4387. pche5+pchqjA=pcho-EF+pchojA	3.98E+11	0.0	12620.0
4388. pche6+pchqjA=pcho-FG+pchojA	3.98E+11	0.0	12620.0
4389. pche1+pchqjB=pcho-AB+pchojB	3.97E+11	0.0	11725.0
4390. pche2+pchqjB=pcho-BC+pchojB	3.98E+11	0.0	12620.0
4391. pche3+pchqjB=pcho-CD+pchojB	1.45E+11	0.0	10135.0
4392. pche4+pchqjB=pcho-DE+pchojB	1.45E+11	0.0	10135.0
4393. pche5+pchqjB=pcho-EF+pchojB	3.98E+11	0.0	12620.0
4394. pche6+pchqjB=pcho-FG+pchojB	3.98E+11	0.0	12620.0
4395. pche1+pchqjC=pcho-AB+pchojC	3.97E+11	0.0	11725.0
4396. pche2+pchqjC=pcho-BC+pchojC	3.98E+11	0.0	12620.0
4397. pche3+pchqjC=pcho-CD+pchojC	1.45E+11	0.0	10135.0
4398. pche4+pchqjC=pcho-DE+pchojC	1.45E+11	0.0	10135.0
4399. pche5+pchqjC=pcho-EF+pchojC	3.98E+11	0.0	12620.0
4400. pche6+pchqjC=pcho-FG+pchojC	3.98E+11	0.0	12620.0
4401. pche1+pchqjD=pcho-AB+pchojD	3.97E+11	0.0	11725.0
4402. pche2+pchqjD=pcho-BC+pchojD	3.98E+11	0.0	12620.0
4403. pche3+pchqjD=pcho-CD+pchojD	1.45E+11	0.0	10135.0
4404. pche4+pchqjD=pcho-DE+pchojD	1.45E+11	0.0	10135.0
4405. pche5+pchqjD=pcho-EF+pchojD	3.98E+11	0.0	12620.0
4406. pche6+pchqjD=pcho-FG+pchojD	3.98E+11	0.0	12620.0
4407. pche1+pchqjE=pcho-AB+pchojE	3.97E+11	0.0	11725.0
4408. pche2+pchqjE=pcho-BC+pchojE	3.98E+11	0.0	12620.0
4409. pche3+pchqjE=pcho-CD+pchojE	1.45E+11	0.0	10135.0
4410. pche4+pchqjE=pcho-DE+pchojE	1.45E+11	0.0	10135.0
4411. pche5+pchqjE=pcho-EF+pchojE	3.98E+11	0.0	12620.0
4412. pche6+pchqjE=pcho-FG+pchojE	3.98E+11	0.0	12620.0
4413. pche1+pchqjF=pcho-AB+pchojF	3.97E+11	0.0	11725.0
4414. pche2+pchqjF=pcho-BC+pchojF	3.98E+11	0.0	12620.0
4415. pche3+pchqjF=pcho-CD+pchojF	1.45E+11	0.0	10135.0
4416. pche4+pchqjF=pcho-DE+pchojF	1.45E+11	0.0	10135.0
4417. pche5+pchqjF=pcho-EF+pchojF	3.98E+11	0.0	12620.0
4418. pche6+pchqjF=pcho-FG+pchojF	3.98E+11	0.0	12620.0
4419. pche1+pchqjG=pcho-AB+pchojG	3.97E+11	0.0	11725.0
4420. pche2+pchqjG=pcho-BC+pchojG	3.98E+11	0.0	12620.0
4421. pche3+pchqjG=pcho-CD+pchojG	1.45E+11	0.0	10135.0
4422. pche4+pchqjG=pcho-DE+pchojG	1.45E+11	0.0	10135.0
4423. pche5+pchqjG=pcho-EF+pchojG	3.98E+11	0.0	12620.0
4424. pche6+pchqjG=pcho-FG+pchojG	3.98E+11	0.0	12620.0
4425. pche1+oh=ApchohB	4.75E+12	0.0	-782.0
4426. pche1+oh=BpchohA	4.75E+12	0.0	-782.0
4427. pche2+oh=BpchohC	4.75E+12	0.0	-782.0
4428. pche2+oh=CpchohB	4.75E+12	0.0	-782.0
4429. pche3+oh=CpchohD	4.75E+12	0.0	-782.0
4430. pche3+oh=DpchohC	4.75E+12	0.0	-782.0
4431. pche4+oh=DpchohE	4.75E+12	0.0	-782.0
4432. pche4+oh=EpchohD	4.75E+12	0.0	-782.0
4433. pche5+oh=EpchohF	4.75E+12	0.0	-782.0
4434. pche5+oh=FpchohE	4.75E+12	0.0	-782.0

4435. pche6+oh=FpchohG	4.75E+12	0.0	-782.0
4436. pche6+oh=GpchohF	4.75E+12	0.0	-782.0
4437. pche1+oh=>ch2o+echA	1.40E+12	0.0	-900.0
4438. pche1+oh=>ch3+echoA	1.40E+12	0.0	-900.0
4439. pche2+oh=>ch3hco+mchA	1.40E+12	0.0	-900.0
4440. pche2+oh=>c2h5+mchoA	1.40E+12	0.0	-900.0
4441. pche3+oh=>ethco+cyc6h11	1.40E+12	0.0	-900.0
4442. pche3+oh=>nc3h7+chxone	1.40E+12	0.0	-900.0
4443. pche4+oh=>Fc9oA	1.40E+12	0.0	-900.0
4444. pche4+oh=>c2h4+Ac7oD	1.40E+12	0.0	-900.0
4445. pche5+oh=>MeEc8oIrA	1.40E+12	0.0	-900.0
4446. pche5+oh=>MeEc8oArI	1.40E+12	0.0	-900.0
4447. pche6+oh=>EtDc7oIrA	1.40E+12	0.0	-900.0
4448. pche6+oh=>EtDc7oArI	1.40E+12	0.0	-900.0
4449. pche1+oh=Apche2+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4450. pche2+oh=Apche2+h2o	3.12E+06	2.0	-298.0
4451. pche2+oh=Dpche2+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
4452. pche3+oh=Dpche2+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4453. pche3+oh=Cpche4+h2o	4.50E+13	0.0	2217.0
4454. pche4+oh=Cpche4+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4455. pche4+oh=Dpche5+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4456. pche5+oh=Dpche5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
4457. pche5+oh=Epche6+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4458. pche6+oh=Epche6+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4459. pche6+oh=Fpche7+h2o	2.25E+13	0.0	2217.0
4460. pche1+ho2=Apche2+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4461. pche2+ho2=Apche2+h2o2	9.63E+03	2.6	13910.0
4462. pche2+ho2=Dpche2+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
4463. pche3+ho2=Dpche2+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4464. pche3+ho2=Cpche4+h2o2	6.40E+12	0.0	14900.0
4465. pche4+ho2=Cpche4+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4466. pche4+ho2=Dpche5+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4467. pche5+ho2=Dpche5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
4468. pche5+ho2=Epche6+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4469. pche6+ho2=Epche6+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4470. pche6+ho2=Fpche7+h2o2	3.20E+12	0.0	14900.0
4471. pche1+c2h5=Apche2+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
4472. pche2+c2h5=Apche2+c2h6	2.23E+00	3.5	6637.0
4473. pche2+c2h5=Dpche2+c2h6	6.72E+10	0.0	7214.0
4474. pche3+c2h5=Dpche2+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
4475. pche3+c2h5=Cpche4+c2h6	2.00E+11	0.0	7300.0
4476. pche4+c2h5=Cpche4+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
4477. pche4+c2h5=Dpche5+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
4478. pche5+c2h5=Dpche5+c2h6	6.72E+10	0.0	7214.0
4479. pche5+c2h5=Epche6+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
4480. pche6+c2h5=Epche6+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
4481. pche6+c2h5=Fpche7+c2h6	1.00E+11	0.0	7300.0
4482. pche1+nc3h7=Apche2+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
4483. pche2+nc3h7=Apche2+c3h8	2.23E+00	3.5	6637.0
4484. pche2+nc3h7=Dpche2+c3h8	6.72E+10	0.0	7214.0
4485. pche3+nc3h7=Dpche2+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
4486. pche3+nc3h7=Cpche4+c3h8	2.00E+11	0.0	7300.0
4487. pche4+nc3h7=Cpche4+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
4488. pche4+nc3h7=Dpche5+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
4489. pche5+nc3h7=Dpche5+c3h8	6.72E+10	0.0	7214.0
4490. pche5+nc3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
4491. pche6+nc3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
4492. pche6+nc3h7=Fpche7+c3h8	1.00E+11	0.0	7300.0
4493. pche1+ic3h7=Apche2+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
4494. pche2+ic3h7=Apche2+c3h8	6.62E-02	4.0	8068.0
4495. pche2+ic3h7=Dpche2+c3h8	6.72E+10	0.0	8214.0
4496. pche3+ic3h7=Dpche2+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
4497. pche3+ic3h7=Cpche4+c3h8	2.00E+11	0.0	8300.0
4498. pche4+ic3h7=Cpche4+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
4499. pche4+ic3h7=Dpche5+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
4500. pche5+ic3h7=Dpche5+c3h8	6.72E+10	0.0	8214.0
4501. pche5+ic3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
4502. pche6+ic3h7=Epche6+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
4503. pche6+ic3h7=Fpche7+c3h8	1.00E+11	0.0	8300.0
4504. pche1+c2h3=Apche2+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
4505. pche2+c2h3=Apche2+c2h4	6.62E-02	4.0	8068.0
4506. pche2+c2h3=Dpche2+c2h4	6.72E+10	0.0	8214.0
4507. pche3+c2h3=Dpche2+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
4508. pche3+c2h3=Cpche4+c2h4	2.00E+11	0.0	8300.0
4509. pche4+c2h3=Cpche4+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
4510. pche4+c2h3=Dpche5+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
4511. pche5+c2h3=Dpche5+c2h4	6.72E+10	0.0	8214.0
4512. pche5+c2h3=Epche6+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
4513. pche6+c2h3=Fpche7+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
4514. pche1+c2h5o2=Apche2+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4515. pche2+c2h5o2=Apche2+c2h5o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
4516. pche2+c2h5o2=Dpche2+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
4517. pche3+c2h5o2=Dpche2+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4518. pche3+c2h5o2=Cpche4+c2h5o2h	2.80E+12	0.0	14900.0
4519. pche4+c2h5o2=Cpche4+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4520. pche4+c2h5o2=Dpche5+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4521. pche5+c2h5o2=Dpche5+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
4522. pche5+c2h5o2=Epche6+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4523. pche6+c2h5o2=Epche6+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4524. pche6+c2h5o2=Fpche7+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4525. pche1+ac3h5=Apche2+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
4526. pche2+ac3h5=Apche2+c3h6	1.18E+11	0.0	12400.0
4527. pche2+ac3h5=Dpche2+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
4528. pche3+ac3h5=Dpche2+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
4529. pche3+ac3h5=Cpche4+c3h6	1.58E+11	0.0	12400.0
4530. pche4+ac3h5=Cpche4+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
4531. pche4+ac3h5=Dpche5+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
4532. pche5+ac3h5=Dpche5+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
4533. pche5+ac3h5=Epche6+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
4534. pche6+ac3h5=Epche6+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
4535. pche6+ac3h5=Fpche7+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
4536. pche1+nc3h7o2=Apche2+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4537. pche2+nc3h7o2=Apche2+nc3h7o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
4538. pche2+nc3h7o2=Dpche2+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
4539. pche3+nc3h7o2=Dpche2+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4540. pche3+nc3h7o2=Cpche4+nc3h7o2h	2.80E+12	0.0	14900.0
4541. pche4+nc3h7o2=Cpche4+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4542. pche4+nc3h7o2=Dpche5+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4543. pche5+nc3h7o2=Dpche5+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
4544. pche5+nc3h7o2=Epche6+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4545. pche6+nc3h7o2=Epche6+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4546. pche6+nc3h7o2=Fpche7+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4547. pche1+ch3=Apche2+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4548. pche2+ch3=Apche2+ch4	2.21E+00	3.5	5683.0
4549. pche2+ch3=Dpche2+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
4550. pche3+ch3=Dpche2+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4551. pche3+ch3=Cpche4+ch4	2.00E+11	0.0	7300.0
4552. pche4+ch3=Cpche4+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4553. pche4+ch3=Dpche5+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4554. pche5+ch3=Dpche5+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
4555. pche5+ch3=Epche6+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4556. pche6+ch3=Epche6+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4557. pche6+ch3=Fpche7+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
4558. pche1+ch3o2=Apche2+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4559. pche2+ch3o2=Apche2+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
4560. pche2+ch3o2=Dpche2+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
4561. pche3+ch3o2=Dpche2+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4562. pche3+ch3o2=Cpche4+ch3o2h	2.80E+12	0.0	14900.0
4563. pche4+ch3o2=Cpche4+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4564. pche4+ch3o2=Dpche5+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4565. pche5+ch3o2=Dpche5+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
4566. pche5+ch3o2=Epche6+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4567. pche6+ch3o2=Epche6+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4568. pche6+ch3o2=Fpche7+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
4569. pche1+h=Apche2+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
4570. pche2+h=Apche2+h2	1.73E+05	2.5	2484.0
4571. pche2+h=Dpche2+h2	2.63E+14	0.0	8820.0
4572. pche3+h=Dpche2+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
4573. pche3+h=Cpche4+h2	1.00E+14	0.0	3900.0
4574. pche4+h=Cpche4+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
4575. pche4+h=Dpche5+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
4576. pche5+h=Dpche5+h2	2.63E+14	0.0	8820.0
4577. pche5+h=Epche6+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
4578. pche6+h=Epche6+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
4579. pche6+h=Fpche7+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
4580. pche1+o=Apche2+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4581. pche2+o=Apche2+oh	1.75E+11	0.7	5882.0
4582. pche2+o=Dpche2+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4583. pche3+o=Dpche2+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4584. pche3+o=Cpche4+oh	8.00E+11	0.0	-2100.0
4585. pche4+o=Cpche4+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4586. pche4+o=Dpche5+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4587. pche5+o=Dpche5+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4588. pche5+o=Epche6+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4589. pche6+o=Epche6+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4590. pche6+o=Fpche7+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
4591. pche1+pchA=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
4592. pche2+pchA=Apche2+pch	2.23E+00	3.5	6637.0
4593. pche2+pchA=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
4594. pche3+pchA=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
4595. pche3+pchA=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	7300.0
4596. pche4+pchA=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
4597. pche4+pchA=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
4598. pche5+pchA=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
4599. pche5+pchA=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
4600. pche6+pchA=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
4601. pche6+pchA=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	7300.0
4602. pche1+pchB=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4603. pche2+pchB=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
4604. pche2+pchB=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
4605. pche3+pchB=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4606. pche3+pchB=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
4607. pche4+pchB=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4608. pche4+pchB=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4609. pche5+pchB=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
4610. pche5+pchB=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4611. pche6+pchB=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4612. pche6+pchB=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4613. pche1+pchC=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4614. pche2+pchC=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
4615. pche2+pchC=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
4616. pche3+pchC=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4617. pche3+pchC=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
4618. pche4+pchC=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4619. pche4+pchC=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4620. pche5+pchC=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
4621. pche5+pchC=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4622. pche6+pchC=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4623. pche6+pchC=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4624. pche1+pchD=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4625. pche2+pchD=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
4626. pche2+pchD=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
4627. pche3+pchD=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4628. pche3+pchD=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
4629. pche4+pchD=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4630. pche4+pchD=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4631. pche5+pchD=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
4632. pche5+pchD=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4633. pche6+pchD=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4634. pche6+pchD=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4635. pche1+pchE=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4636. pche2+pchE=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
4637. pche2+pchE=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
4638. pche3+pchE=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4639. pche3+pchE=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
4640. pche4+pchE=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4641. pche4+pchE=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4642. pche5+pchE=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
4643. pche5+pchE=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4644. pche6+pchE=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4645. pche6+pchE=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4646. pche1+pchF=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4647. pche2+pchF=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
4648. pche2+pchF=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
4649. pche3+pchF=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4650. pche3+pchF=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
4651. pche4+pchF=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4652. pche4+pchF=Dpche5+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4653. pche5+pchF=Dpche5+pch	6.72E+10	0.0	7214.0
4654. pche5+pchF=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4655. pche6+pchF=Epche6+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4656. pche6+pchF=Fpche7+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4657. pche1+pchG=Apche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4658. pche2+pchG=Apche2+pch	6.62E-02	4.0	8068.0
4659. pche2+pchG=Dpche2+pch	6.72E+10	0.0	8214.0
4660. pche3+pchG=Dpche2+pch	1.00E+11	0.0	8300.0
4661. pche3+pchG=Cpche4+pch	2.00E+11	0.0	8300.0
4662. pche4+pchG=Cpche4+pch	1.00E+11	0.0	8300.0

4663. pche4+pchG=Dpche5+pch 1.00E+11 0.0 8300.0
4664. pche5+pchG=Dpche5+pch 6.72E+10 0.0 7214.0
4665. pche5+pchG=Epche6+pch 1.00E+11 0.0 8300.0
4666. pche6+pchG=Epche6+pch 1.00E+11 0.0 8300.0
4667. pche6+pchG=Fpche7+pch 1.00E+11 0.0 8300.0
4668. pche1+pchqjA=Apche2+pchqA 1.40E+12 0.0 14900.0
4669. pche2+pchqjA=Apche2+pchqA 9.63E+03 2.6 13910.0
4670. pche2+pchqjA=Dpche2+pchqA 2.66E+11 0.0 11269.0
4671. pche3+pchqjA=Dpche2+pchqA 1.40E+12 0.0 14900.0
4672. pche3+pchqjA=Cpche4+pchqA 2.80E+12 0.0 14900.0
4673. pche4+pchqjA=Cpche4+pchqA 1.40E+12 0.0 14900.0
4674. pche4+pchqjA=Dpche5+pchqA 1.40E+12 0.0 14900.0
4675. pche5+pchqjA=Dpche5+pchqA 2.66E+11 0.0 11269.0
4676. pche5+pchqjA=Epche6+pchqA 1.40E+12 0.0 14900.0
4677. pche6+pchqjA=Epche6+pchqA 1.40E+12 0.0 14900.0
4678. pche6+pchqjA=Fpche7+pchqA 1.40E+12 0.0 14900.0
4679. pche1+pchqjB=Apche2+pchqB 1.40E+12 0.0 14900.0
4680. pche2+pchqjB=Apche2+pchqB 9.63E+03 2.6 13910.0
4681. pche2+pchqjB=Dpche2+pchqB 2.66E+11 0.0 11269.0
4682. pche3+pchqjB=Dpche2+pchqB 1.40E+12 0.0 14900.0
4683. pche3+pchqjB=Cpche4+pchqB 2.80E+12 0.0 14900.0
4684. pche4+pchqjB=Cpche4+pchqB 1.40E+12 0.0 14900.0
4685. pche4+pchqjB=Dpche5+pchqB 1.40E+12 0.0 14900.0
4686. pche5+pchqjB=Dpche5+pchqB 2.66E+11 0.0 11269.0
4687. pche5+pchqjB=Epche6+pchqB 1.40E+12 0.0 14900.0
4688. pche6+pchqjB=Epche6+pchqB 1.40E+12 0.0 14900.0
4689. pche6+pchqjB=Fpche7+pchqB 1.40E+12 0.0 14900.0
4690. pche1+pchqjC=Apche2+pchqC 1.40E+12 0.0 14900.0
4691. pche2+pchqjC=Apche2+pchqC 9.63E+03 2.6 13910.0
4692. pche2+pchqjC=Dpche2+pchqC 2.66E+11 0.0 11269.0
4693. pche3+pchqjC=Dpche2+pchqC 1.40E+12 0.0 14900.0
4694. pche3+pchqjC=Cpche4+pchqC 2.80E+12 0.0 14900.0
4695. pche4+pchqjC=Cpche4+pchqC 1.40E+12 0.0 14900.0
4696. pche4+pchqjC=Dpche5+pchqC 1.40E+12 0.0 14900.0
4697. pche5+pchqjC=Dpche5+pchqC 2.66E+11 0.0 11269.0
4698. pche5+pchqjC=Epche6+pchqC 1.40E+12 0.0 14900.0
4699. pche6+pchqjC=Epche6+pchqC 1.40E+12 0.0 14900.0
4700. pche6+pchqjC=Fpche7+pchqC 1.40E+12 0.0 14900.0
4701. pche1+pchqjD=Apche2+pchqD 1.40E+12 0.0 14900.0
4702. pche2+pchqjD=Apche2+pchqD 9.63E+03 2.6 13910.0
4703. pche2+pchqjD=Dpche2+pchqD 2.66E+11 0.0 11269.0
4704. pche3+pchqjD=Dpche2+pchqD 1.40E+12 0.0 14900.0
4705. pche3+pchqjD=Cpche4+pchqD 2.80E+12 0.0 14900.0
4706. pche4+pchqjD=Cpche4+pchqD 1.40E+12 0.0 14900.0
4707. pche4+pchqjD=Dpche5+pchqD 1.40E+12 0.0 14900.0
4708. pche5+pchqjD=Dpche5+pchqD 2.66E+11 0.0 11269.0
4709. pche5+pchqjD=Epche6+pchqD 1.40E+12 0.0 14900.0
4710. pche6+pchqjD=Epche6+pchqD 1.40E+12 0.0 14900.0
4711. pche6+pchqjD=Fpche7+pchqD 1.40E+12 0.0 14900.0
4712. pche1+pchqjE=Apche2+pchqE 1.40E+12 0.0 14900.0
4713. pche2+pchqjE=Apche2+pchqE 9.63E+03 2.6 13910.0
4714. pche2+pchqjE=Dpche2+pchqE 2.66E+11 0.0 11269.0
4715. pche3+pchqjE=Dpche2+pchqE 1.40E+12 0.0 14900.0
4716. pche3+pchqjE=Cpche4+pchqE 2.80E+12 0.0 14900.0
4717. pche4+pchqjE=Cpche4+pchqE 1.40E+12 0.0 14900.0
4718. pche4+pchqjE=Dpche5+pchqE 1.40E+12 0.0 14900.0
4719. pche5+pchqjE=Dpche5+pchqE 2.66E+11 0.0 11269.0
4720. pche5+pchqjE=Epche6+pchqE 1.40E+12 0.0 14900.0
4721. pche6+pchqjE=Epche6+pchqE 1.40E+12 0.0 14900.0
4722. pche6+pchqjE=Fpche7+pchqE 1.40E+12 0.0 14900.0
4723. pche1+pchqjF=Apche2+pchqF 1.40E+12 0.0 14900.0
4724. pche2+pchqjF=Apche2+pchqF 9.63E+03 2.6 13910.0
4725. pche2+pchqjF=Dpche2+pchqF 2.66E+11 0.0 11269.0
4726. pche3+pchqjF=Dpche2+pchqF 1.40E+12 0.0 14900.0
4727. pche3+pchqjF=Cpche4+pchqF 2.80E+12 0.0 14900.0
4728. pche4+pchqjF=Cpche4+pchqF 1.40E+12 0.0 14900.0
4729. pche4+pchqjF=Dpche5+pchqF 1.40E+12 0.0 14900.0
4730. pche5+pchqjF=Dpche5+pchqF 2.66E+11 0.0 11269.0
4731. pche5+pchqjF=Epche6+pchqF 1.40E+12 0.0 14900.0
4732. pche6+pchqjF=Epche6+pchqF 1.40E+12 0.0 14900.0
4733. pche6+pchqjF=Fpche7+pchqF 1.40E+12 0.0 14900.0
4734. pche1+pchqjG=Apche2+pchqG 1.40E+12 0.0 14900.0
4735. pche2+pchqjG=Apche2+pchqG 9.63E+03 2.6 13910.0
4736. pche2+pchqjG=Dpche2+pchqG 2.66E+11 0.0 11269.0
4737. pche3+pchqjG=Dpche2+pchqG 1.40E+12 0.0 14900.0
4738. pche3+pchqjG=Cpche4+pchqG 2.80E+12 0.0 14900.0
4739. pche4+pchqjG=Cpche4+pchqG 1.40E+12 0.0 14900.0
4740. pche4+pchqjG=Dpche5+pchqG 1.40E+12 0.0 14900.0
4741. pche5+pchqjG=Dpche5+pchqG 2.66E+11 0.0 11269.0
4742. pche5+pchqjG=Epche6+pchqG 1.40E+12 0.0 14900.0
4743. pche6+pchqjG=Epche6+pchqG 1.40E+12 0.0 14900.0
4744. pche6+pchqjG=Fpche7+pchqG 1.40E+12 0.0 14900.0
4745. pcho-AB+ch3=ApchoB+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4746. pcho-AB+ch3=BpchoA+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4747. pcho-AB+ch3o2=ApchoB+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4748. pcho-AB+ch3o2=BpchoA+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4749. pcho-AB+h=ApchoB+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4750. pcho-AB+h=BpchoA+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4751. pcho-AB+ho2=ApchoB+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4752. pcho-AB+ho2=BpchoA+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4753. pcho-AB+o=ApchoB+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4754. pcho-AB+o=BpchoA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4755. pcho-AB+oh=ApchoB+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4756. pcho-AB+oh=BpchoA+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4757. pcho-AC+ch3=ApchoC+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4758. pcho-AC+ch3=CpchoA+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4759. pcho-AC+ch3o2=ApchoC+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4760. pcho-AC+ch3o2=CpchoA+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4761. pcho-AC+h=ApchoC+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4762. pcho-AC+h=CpchoA+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4763. pcho-AC+ho2=ApchoC+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4764. pcho-AC+ho2=CpchoA+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4765. pcho-AC+o=ApchoC+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4766. pcho-AC+o=CpchoA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4767. pcho-AC+oh=ApchoC+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4768. pcho-AC+oh=CpchoA+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4769. pcho-AD+ch3=DpchoA+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4770. pcho-AD+ch3o2=DpchoA+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4771. pcho-AD+h=DpchoA+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4772. pcho-AD+ho2=DpchoA+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4773. pcho-AD+o=DpchoA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4774. pcho-AD+oh=DpchoA+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4775. pcho-AE+ch3=ApchoE+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4776. pcho-AE+ch3=EpchoA+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4777. pcho-AE+ch3o2=ApchoE+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4778. pcho-AE+ch3o2=EpchoA+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4779. pcho-AE+h=ApchoE+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4780. pcho-AE+h=EpchoA+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4781. pcho-AE+ho2=ApchoE+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4782. pcho-AE+ho2=EpchoA+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4783. pcho-AE+o=ApchoE+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4784. pcho-AE+o=EpchoA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4785. pcho-AE+oh=ApchoE+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4786. pcho-AE+oh=EpchoA+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4787. pcho-AF+ch3=ApchoF+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4788. pcho-AF+ch3=FpchoA+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4789. pcho-AF+ch3o2=ApchoF+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4790. pcho-AF+ch3o2=FpchoA+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4791. pcho-AF+h=ApchoF+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4792. pcho-AF+h=FpchoA+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4793. pcho-AF+ho2=ApchoF+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4794. pcho-AF+ho2=FpchoA+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4795. pcho-AF+o=ApchoF+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4796. pcho-AF+o=FpchoA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4797. pcho-AF+oh=ApchoF+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4798. pcho-AF+oh=FpchoA+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4799. pcho-BC+ch3=BpchoC+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4800. pcho-BC+ch3=CpchoB+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4801. pcho-BC+ch3o2=BpchoC+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4802. pcho-BC+ch3o2=CpchoB+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4803. pcho-BC+h=BpchoC+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4804. pcho-BC+h=CpchoB+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4805. pcho-BC+ho2=BpchoC+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4806. pcho-BC+ho2=CpchoB+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4807. pcho-BC+o=BpchoC+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4808. pcho-BC+o=CpchoB+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4809. pcho-BC+oh=BpchoC+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4810. pcho-BC+oh=CpchoB+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4811. pcho-BD+ch3=DpchoB+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4812. pcho-BD+ch3o2=DpchoB+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4813. pcho-BD+h=DpchoB+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4814. pcho-BD+ho2=DpchoB+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4815. pcho-BD+o=DpchoB+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4816. pcho-BD+oh=DpchoB+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4817. pcho-BE+ch3=BpchoE+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4818. pcho-BE+ch3=EpchoB+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4819. pcho-BE+ch3o2=BpchoE+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4820. pcho-BE+ch3o2=EpchoB+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4821. pcho-BE+h=BpchoE+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4822. pcho-BE+h=EpchoB+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4823. pcho-BE+ho2=BpchoE+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4824. pcho-BE+ho2=EpchoB+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4825. pcho-BE+o=BpchoE+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4826. pcho-BE+o=EpchoB+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4827. pcho-BE+oh=BpchoE+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4828. pcho-BE+oh=EpchoB+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4829. pcho-BF+ch3=BpchoF+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4830. pcho-BF+ch3=FpchoB+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4831. pcho-BF+ch3o2=BpchoF+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4832. pcho-BF+ch3o2=FpchoB+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4833. pcho-BF+h=BpchoF+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4834. pcho-BF+h=FpchoB+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4835. pcho-BF+ho2=BpchoF+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4836. pcho-BF+ho2=FpchoB+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4837. pcho-BF+o=BpchoF+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4838. pcho-BF+o=FpchoB+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4839. pcho-BF+oh=BpchoF+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4840. pcho-BF+oh=FpchoB+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4841. pcho-BG+ch3=BpchoG+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4842. pcho-BG+ch3=GpchoB+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4843. pcho-BG+ch3o2=BpchoG+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4844. pcho-BG+ch3o2=GpchoB+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4845. pcho-BG+h=BpchoG+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4846. pcho-BG+h=GpchoB+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4847. pcho-BG+ho2=BpchoG+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4848. pcho-BG+ho2=GpchoB+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4849. pcho-BG+o=BpchoG+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4850. pcho-BG+o=GpchoB+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4851. pcho-BG+oh=BpchoG+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4852. pcho-BG+oh=GpchoB+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4853. pcho-CD+ch3=DpchoC+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4854. pcho-CD+ch3o2=DpchoC+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4855. pcho-CD+h=DpchoC+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4856. pcho-CD+ho2=DpchoC+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4857. pcho-CD+o=DpchoC+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4858. pcho-CD+oh=DpchoC+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4859. pcho-CE+ch3=CpchoE+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4860. pcho-CE+ch3=EpchoC+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4861. pcho-CE+ch3o2=CpchoE+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4862. pcho-CE+ch3o2=EpchoC+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4863. pcho-CE+h=CpchoE+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4864. pcho-CE+h=EpchoC+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4865. pcho-CE+ho2=CpchoE+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4866. pcho-CE+ho2=EpchoC+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4867. pcho-CE+o=CpchoE+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4868. pcho-CE+o=EpchoC+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4869. pcho-CE+oh=CpchoE+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4870. pcho-CE+oh=EpchoC+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4871. pcho-CF+ch3=CpchoF+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4872. pcho-CF+ch3=FpchoC+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4873. pcho-CF+ch3o2=CpchoF+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4874. pcho-CF+ch3o2=FpchoC+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4875. pcho-CF+h=CpchoF+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4876. pcho-CF+h=FpchoC+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4877. pcho-CF+ho2=CpchoF+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4878. pcho-CF+ho2=FpchoC+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4879. pcho-CF+o=CpchoF+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4880. pcho-CF+o=FpchoC+oh 5.00E+12 0.0 0.0
4881. pcho-CF+oh=CpchoF+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4882. pcho-CF+oh=FpchoC+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4883. pcho-CG+ch3=CpchoG+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4884. pcho-CG+ch3=GpchoC+ch4 2.00E+11 0.0 10000.0
4885. pcho-CG+ch3o2=CpchoG+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4886. pcho-CG+ch3o2=GpchoC+ch3o2h 1.00E+13 0.0 19000.0
4887. pcho-CG+h=CpchoG+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4888. pcho-CG+h=GpchoC+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4889. pcho-CG+ho2=CpchoG+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0
4890. pcho-CG+ho2=GpchoC+h2o2 4.00E+12 0.0 17000.0

4891.	pcho-CG+o=CpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4892.	pcho-CG+o=GpchoC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4893.	pcho-CG+oh=CpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4894.	pcho-CG+oh=GpchoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4895.	pcho-DE+ch3=DpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4896.	pcho-DE+ch3o2=DpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4897.	pcho-DE+h=DpchoE+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4898.	pcho-DE+ho2=DpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4899.	pcho-DE+o=DpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4900.	pcho-DE+oh=DpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4901.	pcho-DF+ch3=DpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4902.	pcho-DF+ch3o2=DpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4903.	pcho-DF+h=DpchoF+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4904.	pcho-DF+ho2=DpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4905.	pcho-DF+o=DpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4906.	pcho-DF+oh=DpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4907.	pcho-DG+ch3=DpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4908.	pcho-DG+ch3o2=DpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4909.	pcho-DG+h=DpchoG+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4910.	pcho-DG+ho2=DpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4911.	pcho-DG+o=DpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4912.	pcho-DG+oh=DpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4913.	pcho-EF+ch3=EpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4914.	pcho-EF+ch3=FpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4915.	pcho-EF+ch3o2=EpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4916.	pcho-EF+ch3o2=FpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4917.	pcho-EF+h=EpchoF+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4918.	pcho-EF+h=FpchoE+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4919.	pcho-EF+ho2=EpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4920.	pcho-EF+ho2=FpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4921.	pcho-EF+o=EpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4922.	pcho-EF+o=FpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4923.	pcho-EF+oh=EpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4924.	pcho-EF+oh=FpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4925.	pcho-EG+ch3=EpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4926.	pcho-EG+ch3=GpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4927.	pcho-EG+ch3o2=EpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4928.	pcho-EG+ch3o2=GpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4929.	pcho-EG+h=EpchoG+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4930.	pcho-EG+h=GpchoE+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4931.	pcho-EG+ho2=EpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4932.	pcho-EG+ho2=GpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4933.	pcho-EG+o=EpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4934.	pcho-EG+o=GpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4935.	pcho-EG+oh=EpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4936.	pcho-EG+oh=GpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4937.	pcho-EH+ch3=EpchoH+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4938.	pcho-EH+ch3=HpchoE+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4939.	pcho-EH+ch3o2=EpchoH+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4940.	pcho-EH+ch3o2=HpchoE+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4941.	pcho-EH+h=EpchoH+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4942.	pcho-EH+h=HpchoE+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4943.	pcho-EH+ho2=EpchoH+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4944.	pcho-EH+ho2=HpchoE+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4945.	pcho-EH+o=EpchoH+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4946.	pcho-EH+o=HpchoE+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4947.	pcho-EH+oh=EpchoH+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4948.	pcho-EH+oh=HpchoE+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4949.	pcho-EI+ch3=IpchoE+ch4	4.00E+11	0.0	10000.0
4950.	pcho-EI+ch3o2=IpchoE+ch3o2h	2.00E+13	0.0	19000.0
4951.	pcho-EI+h=IpchoE+h2	5.40E+07	2.0	5000.0
4952.	pcho-EI+ho2=IpchoE+h2o2	8.00E+12	0.0	17000.0
4953.	pcho-EI+o=IpchoE+oh	1.00E+13	0.0	0.0
4954.	pcho-EI+oh=IpchoE+h2o	1.56E+07	2.0	-765.0
4955.	pcho-FG+ch3=FpchoG+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4956.	pcho-FG+ch3=GpchoF+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
4957.	pcho-FG+ch3o2=FpchoG+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4958.	pcho-FG+ch3o2=GpchoF+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
4959.	pcho-FG+h=FpchoG+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4960.	pcho-FG+h=GpchoF+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
4961.	pcho-FG+ho2=FpchoG+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4962.	pcho-FG+ho2=GpchoF+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
4963.	pcho-FG+o=FpchoG+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4964.	pcho-FG+o=GpchoF+oh	5.00E+12	0.0	0.0
4965.	pcho-FG+oh=FpchoG+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4966.	pcho-FG+oh=GpchoF+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
4967.	pcho-FH+ch3=HpchoF+ch4	4.00E+11	0.0	10000.0
4968.	pcho-FH+ch3o2=HpchoF+ch3o2h	2.00E+13	0.0	19000.0
4969.	pcho-FH+h=HpchoF+h2	5.40E+07	2.0	5000.0
4970.	pcho-FH+ho2=HpchoF+h2o2	8.00E+12	0.0	17000.0
4971.	pcho-FH+o=HpchoF+oh	1.00E+13	0.0	0.0
4972.	pcho-FH+oh=HpchoF+h2o	1.56E+07	2.0	-765.0
4973.	ApchohB+o2=Ao2pchohB	2.00E+12	0.0	0.0
4974.	BpchohA+o2=Bo2pchohA	2.00E+12	0.0	0.0
4975.	BpchohC+o2=Bo2pchohC	2.00E+12	0.0	0.0
4976.	CpchohB+o2=Co2pchohB	2.00E+12	0.0	0.0
4977.	CpchohD+o2=Co2pchohD	2.00E+12	0.0	0.0
4978.	DpchohC+o2=Do2pchohC	2.00E+12	0.0	0.0
4979.	DpchohE+o2=Do2pchohE	2.00E+12	0.0	0.0
4980.	EpchohD+o2=Eo2pchohD	2.00E+12	0.0	0.0
4981.	EpchohF+o2=Eo2pchohF	2.00E+12	0.0	0.0
4982.	FpchohE+o2=Fo2pchohE	2.00E+12	0.0	0.0
4983.	FpchohG+o2=Fo2pchohG	2.00E+12	0.0	0.0
4984.	GpchohF+o2=Go2pchohF	2.00E+12	0.0	0.0
4985.	Ao2pchohB=>oh+echoA+ch2o	1.00E+16	0.0	25000.0
4986.	Bo2pchohA=>oh+echoA+ch2o	1.00E+16	0.0	25000.0
4987.	Bo2pchohC=>oh+mchoA+ch3hco	1.00E+16	0.0	25000.0
4988.	Co2pchohB=>oh+mchoA+ch3hco	1.00E+16	0.0	25000.0
4989.	Co2pchohD=>oh+chxone+ethco	1.00E+16	0.0	25000.0
4990.	Do2pchohC=>oh+chxone+ethco	1.00E+16	0.0	25000.0
4991.	Do2pchohE=>oh+c9oAoF	1.00E+16	0.0	25000.0
4992.	Eo2pchohD=>oh+c9oAoF	1.00E+16	0.0	25000.0
4993.	Eo2pchohF=>oh+MeEc8oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
4994.	Fo2pchohE=>oh+MeEc8oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
4995.	Fo2pchohG=>oh+EtDc7oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
4996.	Go2pchohF=>oh+EtDc7oAoI	1.00E+16	0.0	25000.0
4997.	c9oAoF+oh=c9oyAoF+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
4998.	c9oAoF+h=c9oyAoF+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
4999.	c9oAoF+ho2=c9oyAoF+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5000.	c9oyAoF=Hc8oD+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5001.	c9oyAoF+ho2=Hc8oD+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5002.	c2h4+Ac6oC=Hc8oD	1.76E+04	2.5	6130.0
5003.	c2h4+c3h7co=Ac6oC	1.00E+11	0.0	7800.0
5004.	MeEc8oAoI+oh=MeEc8oAoyI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5005.	MeEc8oAoI+h=MeEc8oAoyI+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5006.	MeEc8oAoI+ho2=MeEc8oAoyI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5007.	MeEc8oAoI+oh=MeEc8oyAoI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5008.	MeEc8oAoI+h=MeEc8oyAoI+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5009.	MeEc8oAoI+ho2=MeEc8oyAoI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5010.	MeEc8oAoyI=Ec8oA+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5011.	MeEc8oAoyI+ho2=Ec8oA+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5012.	MeEc8oyAoI=MeDc7oHrA+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5013.	MeEc8oyAoI+ho2=MeDc7oHrA+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5014.	c2h4+MeBc5oArF=MeDc7oHrA	1.76E+04	2.5	6130.0
5015.	c5h10+hco=MeBc5oArF	1.76E+04	2.5	6130.0
5016.	nc3h7+acrol=MeBc5oArF	1.76E+04	2.5	6130.0
5017.	ch2ch2hco+c5h10=Ec8oA	1.76E+04	2.5	6130.0
5018.	c6e5oA+c2h5=Ec8oA	1.76E+04	2.5	6130.0
5019.	EtDc7oAoI+oh=EtDc7oAoyI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5020.	EtDc7oAoI+h=EtDc7oAoyI+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5021.	EtDc7oAoI+ho2=EtDc7oAoyI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5022.	EtDc7oAoI+oh=EtDc7oyAoI+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5023.	EtDc7oAoI+h=EtDc7oyAoI+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5024.	EtDc7oAoI+ho2=EtDc7oyAoI+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5025.	EtDc7oAoyI=MeDc7oArH+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5026.	EtDc7oAoyI+ho2=MeDc7oArH+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5027.	EtDc7oyAoI=EtCc6oArH+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5028.	EtDc7oyAoI+ho2=EtCc6oArH+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5029.	c5h10+ch2ch2hco=MeDc7oArH	1.76E+04	2.5	6130.0
5030.	nc3h7+c4h7hco-1=MeDc7oArH	1.76E+04	2.5	6130.0
5031.	c2h4+Cc6oA=EtCc6oArH	1.76E+04	2.5	6130.0
5032.	c5h10+hco=Cc6oA	1.76E+04	2.5	6130.0
5033.	c2h5+ac3h5hco=Cc6oA	1.76E+04	2.5	6130.0
5034.	BpchqA=oh+pcho-AB	7.50E+10	0.0	22000.0
5035.	CpchqA=oh+pcho-AC	6.25E+09	0.0	15250.0
5036.	DpchqA=oh+pcho-AD	5.20E+08	0.0	6500.0
5037.	EpchqA=oh+pcho-AE	4.33E+07	0.0	1800.0
5038.	ApchqB=oh+pcho-AB	2.95E+11	0.0	22000.0
5039.	CpchqB=oh+pcho-BC	2.95E+11	0.0	22000.0
5040.	DpchqB=oh+pcho-BD	2.50E+10	0.0	15250.0
5041.	EpchqB=oh+pcho-BE	2.10E+08	0.0	6500.0
5042.	FpchqB=oh+pcho-BF	1.50E+08	0.0	1800.0
5043.	ApchqC=oh+pcho-AC	2.50E+10	0.0	15250.0
5044.	BpchqC=oh+pcho-BC	2.95E+11	0.0	22000.0
5045.	DpchqC=oh+pcho-CD	2.95E+11	0.0	22000.0
5046.	EpchqC=oh+pcho-CE	2.50E+10	0.0	15250.0
5047.	FpchqC=oh+pcho-CF	2.10E+08	0.0	6500.0
5048.	GpchqC=oh+pcho-CG	1.50E+08	0.0	1800.0
5049.	ApchqD=oh+pcho-AD	2.10E+08	0.0	6500.0
5050.	BpchqD=oh+pcho-BD	2.50E+10	0.0	15250.0
5051.	CpchqD=oh+pcho-CD	2.95E+11	0.0	22000.0
5052.	EpchqD=oh+pcho-DE	5.80E+12	0.0	13400.0
5053.	FpchqD=oh+pcho-DF	1.40E+12	0.0	20000.0
5054.	GpchqD=oh+pcho-DG	8.60E+12	0.0	18500.0
5055.	ApchqE=oh+pcho-AE	1.50E+08	0.0	1800.0
5056.	BpchqE=oh+pcho-BE	2.10E+08	0.0	6500.0
5057.	CpchqE=oh+pcho-CE	2.50E+10	0.0	15250.0
5058.	DpchqE=oh+pcho-DE	5.80E+12	0.0	13400.0
5059.	FpchqE=oh+pcho-EF	5.80E+12	0.0	13400.0
5060.	GpchqE=oh+pcho-EG	1.40E+12	0.0	20000.0
5061.	HpchqE=oh+pcho-EH	8.60E+12	0.0	18500.0
5062.	IpchqE=oh+pcho-EI	1.40E+12	0.0	20000.0
5063.	BpchqF=oh+pcho-BF	1.50E+08	0.0	1800.0
5064.	CpchqF=oh+pcho-CF	2.10E+08	0.0	6500.0
5065.	DpchqF=oh+pcho-DF	1.40E+12	0.0	20000.0
5066.	EpchqF=oh+pcho-EF	5.80E+12	0.0	13400.0
5067.	GpchqF=oh+pcho-FG	5.80E+12	0.0	13400.0
5068.	HpchqF=oh+pcho-FH	1.40E+12	0.0	20000.0
5069.	IpchqF=oh+pcho-EH	8.60E+12	0.0	18500.0
5070.	CpchqG=oh+pcho-CG	1.50E+08	0.0	1800.0
5071.	DpchqG=oh+pcho-DG	8.60E+12	0.0	18500.0
5072.	EpchqG=oh+pcho-EG	1.40E+12	0.0	20000.0
5073.	FpchqG=oh+pcho-FG	5.80E+12	0.0	13400.0
5074.	ApchqA=oh+pchoA	4.80E+12	0.0	28725.0
5075.	BpchqB=oh+pchoB	4.80E+12	0.0	28725.0
5076.	CpchqC=oh+pchoC	4.80E+12	0.0	28725.0
5077.	EpchqE=oh+pchoE	4.80E+12	0.0	28725.0
5078.	FpchqF=oh+pchoF	4.80E+12	0.0	28725.0
5079.	GpchqG=oh+pchoG	4.80E+12	0.0	28725.0
5080.	ApchqC=oh+c2h4+mchoA	5.00E+13	0.0	25500.0
5081.	CpchqA=oh+ch2o+eche1	5.00E+13	0.0	25500.0
5082.	BpchqD=oh+c3h6+chxone	5.00E+13	0.0	25500.0
5083.	DpchqB=oh+ch3hco+mche1	4.00E+12	0.0	19500.0
5084.	CpchqE=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5085.	EpchqC=oh+ethco+cyc6h10	5.00E+13	0.0	25500.0
5086.	DpchqF=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5087.	FpchqD=oh+c9e8oD	5.00E+13	0.0	25500.0
5088.	EpchqG=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5089.	GpchqE=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5090.	IpchqE=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5091.	HpchqF=oh+c8h15hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5092.	BpchqA+o2=pchqAqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
5093.	CpchqA+o2=pchqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5094.	DpchqA+o2=pchqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5095.	EpchqA+o2=pchqAqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
5096.	FpchqA+o2=pchqAqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5097.	GpchqA+o2=pchqAqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
5098.	ApchqB+o2=pchqBqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
5099.	CpchqB+o2=pchqBqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5100.	DpchqB+o2=pchqBqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5101.	EpchqB+o2=pchqBqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
5102.	FpchqB+o2=pchqBqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5103.	GpchqB+o2=pchqBqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
5104.	ApchqC+o2=pchqCqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
5105.	BpchqC+o2=pchqCqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
5106.	DpchqC+o2=pchqCqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5107.	EpchqC+o2=pchqCqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
5108.	FpchqC+o2=pchqCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5109.	GpchqC+o2=pchqCqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
5110.	ApchqD+o2=pchqDqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
5111.	BpchqD+o2=pchqDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
5112.	CpchqD+o2=pchqDqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5113.	EpchqD+o2=pchqDqjE	1.84E+45	-11.1	6538.0
5114.	FpchqD+o2=pchqDqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5115.	GpchqD+o2=pchqDqjG	1.84E+45	-11.1	6538.0
5116.	ApchqE+o2=pchqEqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
5117.	BpchqE+o2=pchqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
5118.	CpchqE+o2=pchqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0

5119. DpchqE+o2=pchqEqjD 1.84E+45 -11.1 6538.0
5120. FpchqE+o2=pchqEqjF 1.84E+45 -11.1 6538.0
5121. GpchqE+o2=pchqEqjG 1.84E+45 -11.1 6538.0
5122. HpchqE+o2=pchqEqjH 1.84E+45 -11.1 6538.0
5123. IpchqE+o2=pchqEqjI 1.84E+45 -11.1 6538.0
5124. ApchqF+o2=pchqFqjA 4.82E+36 -8.2 5167.0
5125. BpchqF+o2=pchqFqjB 1.84E+45 -11.1 6538.0
5126. CpchqF+o2=pchqFqjC 1.84E+45 -11.1 6538.0
5127. DpchqF+o2=pchqFqjD 1.84E+45 -11.1 6538.0
5128. EpchqF+o2=pchqFqjE 1.84E+45 -11.1 6538.0
5129. GpchqF+o2=pchqFqjG 1.84E+45 -11.1 6538.0
5130. HpchqF+o2=pchqFqjH 1.84E+45 -11.1 6538.0
5131. IpchqF+o2=pchqFqjI 1.84E+45 -11.1 6538.0
5132. ApchqG+o2=pchqGqjA 4.82E+36 -8.2 5167.0
5133. BpchqG+o2=pchqGqjB 1.84E+45 -11.1 6538.0
5134. CpchqG+o2=pchqGqjC 1.84E+45 -11.1 6538.0
5135. DpchqG+o2=pchqGqjD 1.84E+45 -11.1 6538.0
5136. EpchqG+o2=pchqGqjE 1.84E+45 -11.1 6538.0
5137. FpchqG+o2=pchqGqjF 1.84E+45 -11.1 6538.0
5138. pchqAqjB=pchoAqB+oh 3.34E+09 1.0 33500.0
5139. pchqAqjC=pchoAqC+oh 5.75E+08 1.0 26000.0
5140. pchqAqjD=pchoAqD+oh 9.89E+07 1.0 23000.0
5141. pchqBqjA=pchoBqA+oh 1.67E+09 1.0 30500.0
5142. pchqBqjC=pchoBqC+oh 1.67E+09 1.0 30500.0
5143. pchqBqjD=pchoBqD+oh 2.88E+08 1.0 23000.0
5144. pchqBqjE=pchoBqE+oh 3.06E+07 1.0 20645.3
5145. pchqBqjE=DpchqBqE 1.04E+09 1.0 30145.3
5146. pchqBqjE=FpchqBqE 2.07E+09 1.0 33145.3
5147. pchqBqjE=GpchqBqE 2.14E+09 1.0 28226.6
5148. pchqBqjE=HpchqBqE 3.45E+08 1.0 27305.9
5149. pchqBqjE=IpchqBqE 2.14E+09 1.0 28226.6
5150. pchqCqjA=pchoCqA+oh 2.88E+08 1.0 23000.0
5151. pchqCqjB=pchoCqB+oh 1.67E+09 1.0 30500.0
5152. pchqCqjD=pchoCqD+oh 1.67E+09 1.0 30500.0
5153. pchqCqjE=pchoCqE+oh 1.78E+08 1.0 23645.3
5154. pchqCqjF=pchoCqF+oh 1.84E+08 1.0 23226.6
5155. pchqCqjE=DpchqCqE 1.04E+09 1.0 30145.3
5156. pchqCqjE=FpchqCqE 2.07E+09 1.0 33145.3
5157. pchqCqjE=GpchqCqE 2.14E+09 1.0 28226.6
5158. pchqCqjE=HpchqCqE 3.45E+08 1.0 27305.9
5159. pchqCqjE=IpchqCqE 2.14E+09 1.0 28226.6
5160. pchqCqjF=DpchqCqF 1.07E+09 1.0 25226.6
5161. pchqCqjF=EpchqCqF 2.07E+09 1.0 33145.3
5162. pchqCqjF=GpchqCqF 2.07E+09 1.0 33145.3
5163. pchqCqjF=HpchqCqF 2.14E+09 1.0 28226.6
5164. pchqCqjF=IpchqCqF 3.45E+08 1.0 27305.9
5165. pchqDqjF=CpchqDqF 3.68E+08 1.0 25226.6
5166. pchqDqjF=HpchqDqF 2.14E+09 1.0 28226.6
5167. pchqDqjB=EpchqDqB 1.22E+08 1.0 22645.3
5168. pchqEqjA=pchoEqA+oh 5.27E+06 1.0 19645.3
5169. pchqEqjB=pchoEqB+oh 3.06E+07 1.0 20645.3
5170. pchqEqjC=pchoEqC+oh 1.78E+08 1.0 23645.3
5171. pchqEqjD=pchoEqD+oh 1.04E+09 1.0 31145.3
5172. pchqEqjF=pchoEqF+oh 1.04E+09 1.0 31145.3
5173. pchqEqjI=pchoEqI+oh 1.07E+09 1.0 26226.6
5174. pchqEqjG=pchoEqG+oh 1.07E+09 1.0 26226.6
5175. pchqEqjH=pchoEqH+oh 1.73E+08 1.0 25305.9
5176. pchqEqjG=DpchqEqG 1.72E+08 1.0 24305.9
5177. pchqEqjG=FpchqEqG 2.07E+09 1.0 33145.3
5178. pchqEqjG=HpchqEqG 2.07E+09 1.0 33145.3
5179. pchqEqjG=IpchqEqG 2.14E+09 1.0 28226.6
5180. pchqEqjH=CpchqEqH 3.68E+08 1.0 25226.6
5181. pchqEqjH=DpchqEqH 1.08E+09 1.0 25226.6
5182. pchqEqjH=FpchqEqH 2.14E+09 1.0 28226.6
5183. pchqEqjI=BpchqEqI 6.13E+07 1.0 22645.3
5184. pchqEqjI=CpchqEqI 3.56E+08 1.0 25645.3
5185. pchqEqjI=GpchqEqI 2.14E+09 1.0 28226.6
5186. pchqFqjA=pchoFqA+oh 5.43E+06 1.0 21226.6
5187. pchqFqjB=pchoFqB+oh 3.16E+07 1.0 22226.6
5188. pchqFqjC=pchoFqC+oh 1.84E+08 1.0 23226.6
5189. pchqFqjD=pchoFqD+oh 1.07E+09 1.0 26226.6
5190. pchqFqjI=pchoFqI+oh 1.72E+08 1.0 25305.9
5191. pchqFqjH=pchoFqH+oh 1.07E+09 1.0 26226.6
5192. pchqFqjE=pchoFqE+oh 1.04E+09 1.0 31145.3
5193. pchqFqjG=pchoFqG+oh 1.04E+09 1.0 31145.3
5194. pchqFqjD=ApchqDqF 1.48E+08 1.0 25000.0
5195. pchqFqjD=BpchqDqF 5.75E+08 1.0 25000.0
5196. pchqFqjD=GpchqDqF 3.43E+08 1.0 27305.9
5197. pchqFqjD=HpchqDqF 2.14E+09 1.0 28226.6
5198. pchqFqjH=DpchqFqH 1.07E+09 1.0 25226.6
5199. pchqFqjH=CpchqFqH 3.68E+08 1.0 25226.6
5200. pchqFqjH=EpchqFqH 2.07E+09 1.0 33645.3
Declared duplicate reaction...
5201. pchqFqjH=EpchqFqH 3.43E+08 1.0 27305.9
Declared duplicate reaction...
5202. pchqFqjI=BpchqEqH 6.13E+07 1.0 22645.3
5203. pchqFqjI=CpchqEqH 3.56E+08 1.0 25645.3
5204. pchqFqjI=GpchqEqH 2.14E+09 1.0 28226.6
5205. pchqFqjI=IpchqEqH 2.14E+09 1.0 28226.6
5206. pchqGqjD=pchoGqD+oh 1.72E+08 1.0 25305.9
5207. pchqGqjE=pchoGqE+oh 1.07E+09 1.0 26226.6
5208. pchqGqjF=pchoGqF+oh 1.04E+09 1.0 31145.3
5209. pchqGqjE=BpchqEqG 6.13E+07 1.0 22645.3
5210. pchqGqjE=CpchqEqG 3.56E+08 1.0 25645.3
5211. pchqGqjE=IpchqEqG 2.14E+09 1.0 28226.6
5212. Apche2+ho2=pche2ojA+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5213. Apche2+ho2=pche1ojC+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5214. Dpche2+ho2=pche2ojD+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5215. Dpche2+ho2=pche3ojB+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5216. Cpche4+ho2=pche4ojC+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5217. Cpche4+ho2=pche3ojE+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5218. Dpche5+ho2=pche5ojD+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5219. Dpche5+ho2=pche4ojF+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5220. Epche6+ho2=pche6ojE+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5221. Epche6+ho2=pche5ojG+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5222. Fpche7+ho2=pche7ojF+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
5223. Apche2+ch3o2=pche2ojA+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5224. Apche2+ch3o2=pche1ojC+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5225. Dpche2+ch3o2=pche2ojD+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5226. Dpche2+ch3o2=pche3ojB+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5227. Cpche4+ch3o2=pche4ojC+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5228. Cpche4+ch3o2=pche3ojE+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5229. Dpche5+ch3o2=pche5ojD+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5230. Dpche5+ch3o2=pche4ojF+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5231. Epche6+ch3o2=pche6ojE+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5232. Epche6+ch3o2=pche5ojG+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5233. Fpche7+ch3o2=pche7ojF+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5234. Apche2+c2h5o2=pche2ojA+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5235. Apche2+c2h5o2=pche1ojC+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5236. Dpche2+c2h5o2=pche2ojD+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5237. Dpche2+c2h5o2=pche3ojB+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5238. Cpche4+c2h5o2=pche4ojC+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5239. Cpche4+c2h5o2=pche3ojE+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5240. Dpche5+c2h5o2=pche5ojD+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5241. Dpche5+c2h5o2=pche4ojF+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5242. Epche6+c2h5o2=pche6ojE+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5243. Epche6+c2h5o2=pche5ojG+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5244. Fpche7+c2h5o2=pche7ojF+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5245. Apche2+nc3h7o2=pche2ojA+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5246. Apche2+nc3h7o2=pche1ojC+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5247. Dpche2+nc3h7o2=pche2ojD+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5248. Dpche2+nc3h7o2=pche3ojB+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5249. Cpche4+nc3h7o2=pche4ojC+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5250. Cpche4+nc3h7o2=pche3ojE+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5251. Dpche5+nc3h7o2=pche5ojD+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5252. Dpche5+nc3h7o2=pche4ojF+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5253. Epche6+nc3h7o2=pche6ojE+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5254. Epche6+nc3h7o2=pche5ojG+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5255. Fpche7+nc3h7o2=pche7ojF+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
5256. Apche2+pchqjA=pche2ojA+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5257. Apche2+pchqjA=pche1ojC+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5258. Dpche2+pchqjA=pche2ojD+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5259. Dpche2+pchqjA=pche3ojB+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5260. Cpche4+pchqjA=pche4ojC+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5261. Cpche4+pchqjA=pche3ojE+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5262. Dpche5+pchqjA=pche5ojD+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5263. Dpche5+pchqjA=pche4ojF+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5264. Epche6+pchqjA=pche6ojE+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5265. Epche6+pchqjA=pche5ojG+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5266. Fpche7+pchqjA=pche7ojF+pchojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
5267. Apche2+pchqjB=pche2ojA+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5268. Apche2+pchqjB=pche1ojC+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5269. Dpche2+pchqjB=pche2ojD+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5270. Dpche2+pchqjB=pche3ojB+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5271. Cpche4+pchqjB=pche4ojC+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5272. Cpche4+pchqjB=pche3ojE+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5273. Dpche5+pchqjB=pche5ojD+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5274. Dpche5+pchqjB=pche4ojF+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5275. Epche6+pchqjB=pche6ojE+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5276. Epche6+pchqjB=pche5ojG+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5277. Fpche7+pchqjB=pche7ojF+pchojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
5278. Apche2+pchqjC=pche2ojA+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5279. Apche2+pchqjC=pche1ojC+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5280. Dpche2+pchqjC=pche2ojD+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5281. Dpche2+pchqjC=pche3ojB+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5282. Cpche4+pchqjC=pche4ojC+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5283. Cpche4+pchqjC=pche3ojE+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5284. Dpche5+pchqjC=pche5ojD+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5285. Dpche5+pchqjC=pche4ojF+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5286. Epche6+pchqjC=pche6ojE+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5287. Epche6+pchqjC=pche5ojG+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5288. Fpche7+pchqjC=pche7ojF+pchojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
5289. Apche2+pchqjD=pche2ojA+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5290. Apche2+pchqjD=pche1ojC+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5291. Dpche2+pchqjD=pche2ojD+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5292. Dpche2+pchqjD=pche3ojB+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5293. Cpche4+pchqjD=pche4ojC+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5294. Cpche4+pchqjD=pche3ojE+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5295. Dpche5+pchqjD=pche5ojD+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5296. Dpche5+pchqjD=pche4ojF+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5297. Epche6+pchqjD=pche6ojE+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5298. Epche6+pchqjD=pche5ojG+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5299. Fpche7+pchqjD=pche7ojF+pchojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
5300. Apche2+pchqjE=pche2ojA+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5301. Apche2+pchqjE=pche1ojC+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5302. Dpche2+pchqjE=pche2ojD+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5303. Dpche2+pchqjE=pche3ojB+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5304. Cpche4+pchqjE=pche4ojC+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5305. Cpche4+pchqjE=pche3ojE+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5306. Dpche5+pchqjE=pche5ojD+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5307. Dpche5+pchqjE=pche4ojF+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5308. Epche6+pchqjE=pche6ojE+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5309. Epche6+pchqjE=pche5ojG+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5310. Fpche7+pchqjE=pche7ojF+pchojE 1.90E+12 0.0 -1200.0
5311. Apche2+pchqjF=pche2ojA+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5312. Apche2+pchqjF=pche1ojC+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5313. Dpche2+pchqjF=pche2ojD+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5314. Dpche2+pchqjF=pche3ojB+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5315. Cpche4+pchqjF=pche4ojC+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5316. Cpche4+pchqjF=pche3ojE+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5317. Dpche5+pchqjF=pche5ojD+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5318. Dpche5+pchqjF=pche4ojF+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5319. Epche6+pchqjF=pche6ojE+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5320. Epche6+pchqjF=pche5ojG+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5321. Fpche7+pchqjF=pche7ojF+pchojF 1.90E+12 0.0 -1200.0
5322. Apche2+pchqjG=pche2ojA+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5323. Apche2+pchqjG=pche1ojC+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5324. Dpche2+pchqjG=pche2ojD+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5325. Dpche2+pchqjG=pche3ojB+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5326. Cpche4+pchqjG=pche4ojC+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5327. Cpche4+pchqjG=pche3ojE+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5328. Dpche5+pchqjG=pche5ojD+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5329. Dpche5+pchqjG=pche4ojF+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5330. Epche6+pchqjG=pche6ojE+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5331. Epche6+pchqjG=pche5ojG+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5332. Fpche7+pchqjG=pche7ojF+pchojG 1.90E+12 0.0 -1200.0
5333. Apche2+o2=pche1e3+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5334. Dpche2+o2=pche1e3+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5335. Dpche2+o2=pche2e4+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5336. Cpche4+o2=pche2e4+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5337. Cpche4+o2=pche3e5+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5338. Dpche5+o2=pche3e5+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5339. Dpche5+o2=pche4e6+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5340. Epche6+o2=pche4e6+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5341. Epche6+o2=pche5e7+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5342. Fpche7+o2=pche5e7+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
5343. Apche2=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 31230.0
5344. Dpche2=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 37620.0

5345. Cpche4=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	40410.0
5346. Cpche4=ch3+eche1e3	2.00E+13	0.0	32800.0
5347. Dpche5=c2h5+mche1e3	2.00E+13	0.0	31700.0
5348. Dpche5=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	38880.0
5349. Epche6=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	36210.0
5350. Epche6=chdl3+nc3h7	2.00E+13	0.0	34000.0
5351. Fpche7=>2c2h4+c5h7	2.00E+13	0.0	36800.0
5352. Apche2=pche1e3+h	6.00E+12	0.0	41000.0
5353. Dpche2=pche1e3+h	1.80E+13	0.0	46000.0
5354. Dpche2=pche2e4+h	1.20E+13	0.0	43000.0
5355. Cpche4=pche2e4+h	1.20E+13	0.0	41000.0
5356. Cpche4=pche3e5+h	1.20E+13	0.0	56000.0
5357. Dpche5=pche3e5+h	1.20E+13	0.0	57000.0
5358. Dpche5=pche4e6+h	1.20E+13	0.0	45000.0
5359. Epche6=pche4e6+h	6.00E+12	0.0	43000.0
5360. Epche6=pche5e7+h	1.20E+13	0.0	46000.0
5361. Fpche7=pche5e7+h	1.20E+13	0.0	46000.0
5362. pche2ojA=ch2o+Aeche1	7.94E+14	0.0	19000.0
5363. pche1ojC=c2h3+mchoA	7.94E+14	0.0	19000.0
5364. pche1ojC=acrol+cyc6h11	7.94E+14	0.0	19000.0
5365. pche2ojD=sc3h5+chxone	7.94E+14	0.0	19000.0
5366. pche2ojD=>sc3h5+2c2h4+ch2co	7.94E+14	0.0	19000.0
5367. pche3ojB=ch3hco+Amche1	7.94E+14	0.0	19000.0
5368. pche3ojB=ch3+eche2oA	7.94E+14	0.0	19000.0
5369. pche4ojC=ethco+cyc6h9	7.94E+14	0.0	19000.0
5370. pche4ojC=c2h5+mche2oA	7.94E+14	0.0	19000.0
5371. pche3ojE=>2c2h4+c2h5+propynal	7.94E+14	0.0	19000.0
5372. pche5ojD=nc3h7+chxe2oA	7.94E+14	0.0	19000.0
5373. pche4ojF=>nc3h7+c2h4+c3h3hco	7.94E+14	0.0	19000.0
5374. pche6ojE=>c5h10+c3h4hco	7.94E+14	0.0	19000.0
5375. pche5ojG=>c2h4+c2h5+vinacrol	7.94E+14	0.0	19000.0
5376. pche7ojF=>c5h10+c3h4hco	7.94E+14	0.0	19000.0
5377. pchoAojB+oh=pchoAqB	1.81E+13	0.0	0.0
5378. pchoAojC+oh=pchoAqC	1.81E+13	0.0	0.0
5379. pchoAojD+oh=pchoAqD	1.81E+13	0.0	0.0
5380. pchoBojA+oh=pchoBqA	1.81E+13	0.0	0.0
5381. pchoBojC+oh=pchoBqC	1.81E+13	0.0	0.0
5382. pchoBojD+oh=pchoBqD	1.81E+13	0.0	0.0
5383. pchoBojE+oh=pchoBqE	1.81E+13	0.0	0.0
5384. pchoCojA+oh=pchoCqA	1.81E+13	0.0	0.0
5385. pchoCojB+oh=pchoCqB	1.81E+13	0.0	0.0
5386. pchoCojD+oh=pchoCqD	1.81E+13	0.0	0.0
5387. pchoCojE+oh=pchoCqE	1.81E+13	0.0	0.0
5388. pchoCojF+oh=pchoCqF	1.81E+13	0.0	0.0
5389. pchoBojA+oh=pchoEqA	1.81E+13	0.0	0.0
5390. pchoBojB+oh=pchoEqB	1.81E+13	0.0	0.0
5391. pchoBojC+oh=pchoEqC	1.81E+13	0.0	0.0
5392. pchoBojD+oh=pchoEqD	1.81E+13	0.0	0.0
5393. pchoBojF+oh=pchoEqF	1.81E+13	0.0	0.0
5394. pchoBojI+oh=pchoEqI	1.81E+13	0.0	0.0
5395. pchoBojG+oh=pchoEqG	1.81E+13	0.0	0.0
5396. pchoBojH+oh=pchoEqH	1.81E+13	0.0	0.0
5397. pchoFojA+oh=pchoFqA	1.81E+13	0.0	0.0
5398. pchoFojB+oh=pchoFqB	1.81E+13	0.0	0.0
5399. pchoFojC+oh=pchoFqC	1.81E+13	0.0	0.0
5400. pchoFojD+oh=pchoFqD	1.81E+13	0.0	0.0
5401. pchoFojI+oh=pchoFqI	1.81E+13	0.0	0.0
5402. pchoFojH+oh=pchoFqH	1.81E+13	0.0	0.0
5403. pchoFojE+oh=pchoFqE	1.81E+13	0.0	0.0
5404. pchoFojG+oh=pchoFqG	1.81E+13	0.0	0.0
5405. pchoGojD+oh=pchoGqD	1.81E+13	0.0	0.0
5406. pchoGojE+oh=pchoGqE	1.81E+13	0.0	0.0
5407. pchoGojF+oh=pchoGqF	1.81E+13	0.0	0.0
5408. hco+echoA=pchoAojB	1.32E+04	2.5	6130.0
5409. ch2hco+mchoA=pchoAojC	1.00E+11	0.0	3496.0
5410. hcoch2hco+cyc6h11=pchoAojC	2.00E+11	0.0	3496.0
5411. chxone+ch2ch2hco=pchoAojD	5.00E+10	0.0	3457.0
5412. ch2o+echoyA=pchoBojA	3.39E+08	0.0	2490.0
5413. ch3co+mchoA=pchoBojC	1.32E+04	2.5	6130.0
5414. chxone+ch2coch3=pchoBojD	5.00E+10	0.0	3457.0
5415. pchoBojE=>Mec8oor	2.00E+13	0.0	8405.0
5416. Fc9oAoH=pchoBojE	1.00E+08	0.9	5900.0
5417. ch3co+c7e6oA=Fc9oAoH	2.00E+11	0.0	2010.0
5418. c5e4oB+c3h6cho-1=Fc9oAoH	1.32E+04	2.5	6130.0
5419. MeEc8e1oIqG+oh=GpchqBqE	4.76E+07	1.5	34700.0
5420. MeEc8e1oIojG+oh=MeEc8e1oIqG	1.81E+13	0.0	0.0
5421. ch3hco+MeEc6e1oGrF=MeEc8e1oIojG	5.00E+10	0.0	3457.0
5422. acrol+Dc4h7-1=MeEc6e1oGrF	1.32E+04	2.5	6130.0
5423. Ac7oBoG=ch2co+c2h4+ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	34130.0
5424. Ac7oBoG+o2=c7oBoGqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
5425. c7oBoGqjA=Cc7oBoGqA	5.75E+08	1.0	22000.0
5426. c7oBoGqjA=Dc7oBoGqA	9.89E+07	1.0	22000.0
5427. Cc7oBoGqA+o2=c7oBoGqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5428. Dc7oBoGqA+o2=c7oBoGqAqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5429. c7oBoGqAqjC=oh+c7oAoBoGqC	5.75E+08	1.0	23000.0
5430. c7oBoGqAqjD=oh+c7oAoBoGqD	9.89E+07	1.0	20000.0
5431. c7oAoBoGqC=oh+choco+c5oAoE	1.00E+16	0.0	43000.0
5432. c7oAoBoGqD=oh+ch2co+hco+choch2ch2cho	1.00E+16	0.0	43000.0
5433. Fc9e1qEqH=HpchqBqE	1.00E+08	0.9	5900.0
5434. ho2+c9e1e5qH=Fc9e1qEqH	1.00E+11	0.0	7600.0
5435. Fc9e1qEqH=oh+ch3hco+c7e1e6qC	5.00E+13	0.0	25500.0
5436. c9e1e5ojH+oh=c9e1e5qH	1.81E+13	0.0	0.0
5437. ch3hco+Cc7h11-16=c9e1e5ojH	5.00E+10	0.0	3457.0
5438. ac3h5+c4h6=Cc7h11-16	8.80E+03	2.5	6130.0
5439. c7e1e6ojC+oh=c7e1e6qC	1.81E+13	0.0	0.0
5440. Dc4h7-1+acrol=c7e1e6ojC	5.00E+10	0.0	3457.0
5441. c9e5oAqH+oh=IpchqBqE	4.76E+07	1.5	34700.0
5442. c9e5oAojH+oh=c9e5oAqH	1.81E+13	0.0	0.0
5443. ch3hco+Ec7e6oA=c9e5oAojH	5.00E+10	0.0	3457.0
5444. c4h6+ch2ch2hco=Ec7e6oA	1.32E+04	2.5	6130.0
5445. pche4qB+ho2=DpchqBqE	8.00E+10	0.0	6000.0
5446. pche4ojB+oh=pche4qB	1.81E+13	0.0	0.0
5447. ch3hco+Cmche1=pche4ojB	5.00E+10	0.0	3457.0
5448. DpchqBqE=oh+mche1qC+ch3hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5449. mche1ojC+oh=mche1qC	1.81E+13	0.0	0.0
5450. c2h4+ch2ccho=MeBc4e1oErD	2.00E+11	0.0	2010.0
5451. ac3h4+c3h6cho-1=mche1ojC	2.00E+11	0.0	11300.0
5452. c2h4+MeBc4e1oErD=mche1ojC	1.32E+04	2.5	6130.0
5453. ch2ccho+o2=ch2co+oh+co	2.51E+10	0.0	0.0
5454. ch2ccho=c2h3co	2.50E+12	0.0	47000.0
5455. ch2ccho+o2=ch2o+choco	5.01E+12	0.0	19000.0
5456. ch2ccho+o=ch2co+hco	1.81E+14	0.0	0.0
5457. ch2ccho+ho2=oh+ch2co+hco	2.00E+13	0.0	0.0
5458. acrol+oh=ch2ccho+h2o	1.11E+06	2.0	1450.0
5459. acrol+ho2=ch2ccho+h2o2	3.00E+09	0.0	9930.0
5460. pche5qB+ho2=FpchqBqE	8.00E+10	0.0	6000.0
5461. pche5ojB+oh=pche5qB	1.81E+13	0.0	0.0
5462. ch3hco+Amche3=pche5ojB	5.00E+10	0.0	3457.0
5463. Gc7e1e3=Amche3	1.00E+08	0.9	5900.0
5464. c2h4+c5h7=Gc7e1e3	8.80E+03	2.5	6130.0
5465. Fc9e1qAqH=FpchqBqE	1.00E+08	0.9	5900.0
5466. Fc9e1qAqH=oh+c7e1e6qA+ch3hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5467. Bc7e6oA+oh=c7e1e6qA	1.81E+13	0.0	0.0
5468. Dc4h7-1+acrol=Bc7e6oA	1.32E+04	2.5	6130.0
5469. ch2o+AechoB=pchoCojA	5.00E+10	0.0	3457.0
5470. ch3hco+chxco=pchoCojB	1.32E+04	2.5	6130.0
5471. chxone+c2h5co=pchoCojD	1.32E+04	2.5	6130.0
5472. Fc9oAoG=pchoCojE	1.00E+08	0.9	5900.0
5473. c3h6cho-1+c2h5coc2h3=Fc9oAoG	1.32E+04	2.5	6130.0
5474. pchoCojE=>Mec8oor	2.00E+13	0.0	7154.0
5475. c2h5+c7e1oAoG=Fc9oAoG	1.32E+04	2.5	6130.0
5476. c7e1oAoG+oh=c7e1oAoyG+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5477. c7e1oAoG+h=c7e1oAoyG+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5478. c7e1oAoG+ho2=c7e1oAoyG+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5479. c7e1oAoyG=co+Fc6e1oA	2.00E+13	0.0	28700.0
5480. c7e1oAoyG+ho2=oh+co2+Fc6e1oA	2.00E+13	0.0	0.0
5481. c2h4+Dc4e1oA=Fc6e1oA	1.32E+04	2.5	6130.0
5482. c2h4+hcco=Dc4e1oA	1.32E+04	2.5	6130.0
5483. pchoCojF=>Mec8oor	2.00E+13	0.0	7511.0
5484. oh+MeEc8e1oIqF=GpchqCqE	4.76E+07	1.5	34700.0
5485. oh+MeEc8e1oIojF=MeEc8e1oIqF	1.81E+13	0.0	0.0
5486. ethco+Bc6e5oA=MeEc8e1oIojF	1.00E+11	0.0	11900.0
5487. acrol+ac3h5=Bc6e5oA	8.50E+10	0.0	11300.0
5488. IpchqCqE=oh+chxe1qC+ethco	5.00E+13	0.0	25500.0
5489. oh+chxe1ojC=chxe1qC	1.81E+13	0.0	0.0
5490. Fc6e2oA=chxe1ojC	1.00E+08	0.9	5900.0
5491. Fc6e5oA=chxe1ojC	1.00E+08	0.9	5900.0
5492. c2h4+c3h4hco=Fc6e2oA	8.80E+03	2.5	6130.0
5493. c3h4hco+ho2=oh+acrol+hco	1.00E+13	0.0	0.0
5494. c3h4hco+ho2=oh+ch2o+chchhco	1.00E+13	0.0	0.0
5495. c3h4hco+o2=ch2hco+chocho	1.23E+36	-7.2	33600.0
5496. chchhco=c2h3co	1.40E+09	1.0	32100.0
5497. c2h2+hco=chchhco	7.77E+06	1.4	7755.0
5498. chchhco+o2=chocho+hco	5.42E+12	0.0	0.0
5499. oh+c9e5oAqG=IpchqCqE	4.76E+07	1.5	34700.0
5500. oh+c9e5oAojG=c9e5oAqG	1.81E+13	0.0	0.0
5501. ethco+Fc6e5oA=c9e5oAojG	3.39E+08	0.0	2490.0
5502. c2h5+c7e2oAoG=c9e5oAojG	5.00E+10	0.0	3457.0
5503. c7e2oAoG+oh=c7e2oAoyG+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5504. c7e2oAoG+h=c7e2oAoyG+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5505. c7e2oAoG+ho2=c7e2oAoyG+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5506. c7e2oAoyG=co+Fc6e2oA	2.00E+13	0.0	28700.0
5507. c7e2oAoyG+ho2=oh+co2+Fc6e2oA	2.00E+13	0.0	0.0
5508. c7e2oAoG+oh=c7e2oyAoG+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5509. c7e2oAoG+h=c7e2oyAoG+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5510. c7e2oAoG+ho2=c7e2oyAoG+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5511. c7e2oyAoG=co+Fc6e5oA	3.04E+14	-0.5	30510.0
5512. c7e2oyAoG+ho2=oh+co2+Fc6e5oA	2.00E+13	0.0	0.0
5513. Fc9e1qEqG=HpchqCqE	1.00E+08	0.9	5900.0
5514. ho2+c9e1e6qE=Fc9e1qEqG	8.00E+10	0.0	6000.0
5515. ho2+c9e1e5qG=Fc9e1qEqG	8.00E+10	0.0	6000.0
5516. oh+c9e1e6ojE=c9e1e6qE	1.81E+13	0.0	0.0
5517. oh+c9e1e5ojG=c9e1e5qG	1.81E+13	0.0	0.0
5518. c2h5+c7e2e6oA=c9e1e5ojG	5.00E+10	0.0	3457.0
5519. ethco+Ac6h9-15=c9e1e5ojG	1.00E+10	0.0	20000.0
5520. Dc4h7-1+c5e2oA=c9e1e6ojE	5.00E+10	0.0	3457.0
5521. Ac4h7-1+c4h7hco-1=c9e1e6ojE	1.00E+10	0.0	20000.0
5522. EtDc7e1qEqHrI=HpchqCqE	1.00E+08	0.9	5900.0
5523. EtDc7e1e8qE+ho2=EtDc7e1qEqHrI	8.00E+10	0.0	6000.0
5524. EtDc7e1e8ojE+oh=EtDc7e1e8qE	1.81E+13	0.0	0.0
5525. ethco+c6h9=EtDc7e1e8ojE	5.00E+10	0.0	9600.0
5526. c7e2e6oA+oh=c7e2e6oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5527. c7e2e6oA+h=c7e2e6oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5528. c7e2e6oA+ho2=c7e2e6oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5529. c7e2e6oyA=co+Ac6h9-15	3.04E+14	-0.5	30510.0
5530. c5e2oA+oh=c5e2oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5531. c5e2oA+h=c5e2oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5532. c5e2oA+ho2=c5e2oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5533. c5e2oyA=co+Ac4h7-1	3.04E+14	-0.5	30510.0
5534. ho2+pche3qF=DpchqCqF	8.00E+10	0.0	6000.0
5535. oh+pche3ojF=pche3qF	1.81E+13	0.0	0.0
5536. MeEc8e5oArI=pche3ojF	1.00E+08	0.9	5900.0
5537. ch3+MeEc7e6e8oA=MeEc8e5oArI	1.32E+04	2.5	6130.0
5538. EtDc7e4oIrA=pche3ojF	1.00E+08	0.9	5900.0
5539. c2h4+MeCc6e3oArG=EtDc7e4oIrA	8.50E+10	0.0	11300.0
5540. ch3+MeCc5e4e5oA=MeCc6e3oArG	1.32E+04	2.5	6130.0
5541. oh+MeEc8e8oAqF=DpchqCqF	4.76E+07	1.5	34700.0
5542. oh+MeEc8e8oAojF=MeEc8e8oAqF	1.81E+13	0.0	0.0
5543. ethco+Ec6e5oA=MeEc8e8oAojF	3.39E+08	0.0	2490.0
5544. c2h5+MeBc6e7oAoF=MeEc8e8oAojF	5.00E+10	0.0	3457.0
5545. ac3h4+ch2ch2hco=Ec6e5oA	2.00E+11	0.0	11300.0
5546. MeEc7e6e8oA+oh=h2o+MeEc7e6e8oyA	4.20E+12	0.0	500.0
5547. MeEc7e6e8oA+h=h2+MeEc7e6e8oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
5548. MeEc7e6e8oA+ho2=h2o2+MeEc7e6e8oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
5549. MeEc7e6e8oyA=co+MeCc6e1e7rF	2.00E+13	0.0	28700.0
5550. c2h4+isopy=MeCc6e1e7rF	8.50E+10	0.0	11300.0
5551. MeCc5e4e5oA+oh=h2o+MeCc5e4e5oyA	4.20E+12	0.0	500.0
5552. MeCc5e4e5oA+h=h2+MeCc5e4e5oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
5553. MeCc5e4e5oA+ho2=h2o2+MeCc5e4e5oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
5554. MeCc5e4e5oyA=co+isopy	2.00E+13	0.0	28700.0
5555. MeBc6e7oAoF+oh=h2o+MeBc6e7oyAoF	4.20E+12	0.0	500.0
5556. MeBc6e7oAoF+h=h2+MeBc6e7oyAoF	4.00E+13	0.0	4200.0
5557. MeBc6e7oAoF+ho2=h2o2+MeBc6e7oyAoF	1.00E+12	0.0	10000.0
5558. MeBc6e7oyAoF=co+Ec6e5oA	3.04E+14	-0.5	30510.0
5559. MeBc6e7oAoF+oh=h2o+MeBc6e7oAoyF	4.20E+12	0.0	500.0
5560. MeBc6e7oAoF+h=h2+MeBc6e7oAoyF	4.00E+13	0.0	4200.0
5561. MeBc6e7oAoF+ho2=h2o2+MeBc6e7oAoyF	1.00E+12	0.0	10000.0
5562. MeBc6e7oAoyF=co+MeBc5e6oArE	2.00E+13	0.0	28700.0
5563. c2h4+ic3h4hco=MeBc5e6oArE	8.50E+10	0.0	11300.0
5564. ac3h4+hco=ic3h4hco	1.76E+04	2.5	6130.0
5565. oh+EtDc7e1oIqE=HpchqCqF	4.76E+07	1.5	34700.0
5566. oh+EtDc7e1oIojE=EtDc7e1oIqE	1.81E+13	0.0	0.0
5567. ethco+Cc6e5oA=EtDc7e1oIojE	1.00E+11	0.0	11900.0
5568. c2h5+MeCc6e5oAoG=EtDc7e1oIojE	3.33E+10	0.0	6397.0
5569. c2h3+ac3h5hco=Cc6e5oA	2.00E+11	0.0	2010.0
5570. hco+c5h8-14=Cc6e5oA	1.32E+04	2.5	6130.0
5571. MeCc6e5oAoG+oh=h2o+MeCc6e5oyAoG	4.20E+12	0.0	500.0
5572. MeCc6e5oAoG+h=h2+MeCc6e5oyAoG	4.00E+13	0.0	4200.0

5573. MeCc6e5oAoG+ho2=h2o2+MeCc6e5oyAoG	1.00E+12	0.0	10000.0
5574. MeCc6e5oyAoG=co+MeBc5e4oArF	2.00E+13	0.0	28700.0
5575. acrol+ac3h5=MeBc5e4oArF	1.00E+11	0.0	11900.0
5576. MeCc6e5oAoG+oh=h2o+MeCc6e5oAoyG	4.20E+12	0.0	500.0
5577. MeCc6e5oAoG+h=h2+MeCc6e5oAoyG	4.00E+13	0.0	4200.0
5578. MeCc6e5oAoG+ho2=h2o2+MeCc6e5oAoyG	1.00E+12	0.0	10000.0
5579. MeCc6e5oAoyG=co+Cc6e5oA	2.00E+13	0.0	28700.0
5580. ch2o+AechoD=pchoEojA	5.00E+10	0.0	3457.0
5581. ch3hco+AmchoC=pchoEojB	3.33E+10	0.0	6397.0
5582. ethco+Bchxone=pchoEojC	5.00E+10	0.0	9043.0
5583. c2h5+mchoAoC=pchoEojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5584. c2h4+Bchxone=AechoD	1.32E+04	2.5	6130.0
5585. c9oyAoF=pchoEojD	1.00E+08	0.9	5900.0
5586. MeEc8oAoyI=pchoEojF	1.00E+08	0.9	5900.0
5587. EtDc7oAoHrI=pchoEojG	1.00E+08	0.9	5900.0
5588. ch2co+Dc7oA=EtDc7oAoHrI	1.76E+04	2.5	6130.0
5589. c5h10+ch2hco=Dc7oA	8.80E+03	2.5	6130.0
5590. c2h5+c4h7hco-1=Dc7oA	8.80E+03	2.5	6130.0
5591. EtDc7oAoCrI=pchoEojG	1.00E+08	0.9	5900.0
5592. c2h4+Dc7oAoC=EtDc7oAoCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
5593. c2h5+c5e4oAoC=Dc7oAoC	8.80E+03	2.5	6130.0
5594. c3h7chco+ch2hco=Dc7oAoC	1.76E+04	2.5	6130.0
5595. c5e4oAoC+oh=h2o+c5e4oyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
5596. c5e4oAoC+h=h2+c5e4oyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0
5597. c5e4oAoC+ho2=h2o2+c5e4oyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
5598. c5e4oyAoC=co+ch2coc2h3	2.00E+13	0.0	28700.0
5599. c5e4oyAoC+ho2=>ch2coc2h3+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5600. pchoEojH=>Mec8oor	2.00E+13	0.0	7511.0
5601. EtDc7oCoIrA=pchoEojH	1.00E+08	0.9	5900.0
5602. c2h4+c6alCco=EtDc7oCoIrA	2.11E+11	0.0	7350.0
5603. c6alCco=Cc6oA+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5604. c6alCco+ho2=>Cc6oA+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5605. Fc9oAoE=pchoEojI	1.00E+08	0.9	5900.0
5606. pchoEojI=>Mec8oor	2.00E+13	0.0	7810.0
5607. c2h5+c7e6oAoE=Fc9oAoE	1.50E+11	0.0	7200.0
5608. c7e6oAoE+oh=c7e6oyAoE+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5609. c7e6oAoE+h=c7e6oyAoE+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5610. c7e6oAoE+ho2=c7e6oyAoE+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5611. c7e6oyAoE=Fc6e1oC+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5612. c7e6oyAoE+ho2=>Fc6e1oC+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5613. c2h4+ch2coc2h3=Fc6e1oC	2.64E+04	2.5	6130.0
5614. c3h6+AchxqBqD=BpchqEqG	8.80E+03	2.5	6130.0
5615. ho2+chxe1qD=AchxqBqD	8.00E+10	0.0	6000.0
5616. chxe1ojD+oh=chxe1qD	1.81E+13	0.0	0.0
5617. c4h6+ch2hco=chxe1ojD	1.32E+04	2.5	6130.0
5618. c2h4+ac3h4hco1=chxe1ojD	2.00E+11	0.0	2010.0
5619. c2h2+ch2hco=ac3h4hco1	7.77E+06	1.4	7755.0
5620. oh+c9e6oAqC=CpchqEqG	4.76E+07	1.5	34700.0
5621. oh+c9e6oAojC=c9e6oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
5622. hcoch2hco+Ac6h11-3=c9e6oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5623. ch2hco+c7e4oA=c9e6oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5624. c7e4oA+oh=c7e4oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5625. c7e4oA+h=c7e4oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5626. c7e4oA+ho2=c7e4oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5627. c7e4oyA=Ac6h11-3+co	2.80E+13	0.0	28700.0
5628. c7e4oyA+ho2=>Ac6h11-3+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5629. oh+EtDc7e9oAqC=IpchqEqG	4.76E+07	1.5	34700.0
5630. oh+c9e5oAqC=IpchqEqG	4.76E+07	1.5	34700.0
5631. oh+EtDc7e9oAojC=EtDc7e9oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
5632. oh+c9e5oAojC=c9e5oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
5633. hcoch2hco+Cc6h11-1=EtDc7e9oAojC	6.66E+10	0.0	6397.0
5634. ch2hco+MeCc6e1oG=EtDc7e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5635. hcoch2hco+Cc6h11-1=c9e5oAojC	6.66E+10	0.0	6397.0
5636. ch2hco+c7e3oA=c9e5oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5637. MeCc6e1oG+oh=h2o+MeCc6e1oyG	4.20E+12	0.0	500.0
5638. MeCc6e1oG+h=h2+MeCc6e1oyG	4.00E+13	0.0	4200.0
5639. MeCc6e1oG+ho2=h2o2+MeCc6e1oyG	1.00E+12	0.0	10000.0
5640. MeCc6e1oyG=co+Cc6h11-1	2.00E+13	0.0	28700.0
5641. c7e3oA+oh=h2o+c7e3oyA	4.20E+12	0.0	500.0
5642. c7e3oA+h=h2+c7e3oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
5643. c7e3oA+ho2=h2o2+c7e3oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
5644. c7e3oyA=co+Cc6h11-1	2.00E+13	0.0	28700.0
5645. c3h6+BchxqAqD=BpchqEqH	8.80E+03	2.5	6130.0
5646. chxe1qD+ho2=BchxqAqD	8.00E+10	0.0	6000.0
5647. oh+c9e6oAqD=CpchqEqH	4.76E+07	1.5	34700.0
5648. oh+c9e6oAojD=c9e6oAqD	1.81E+13	0.0	0.0
5649. choch2ch2cho+Cc5h9-1=c9e6oAojD	5.00E+10	0.0	9600.0
5650. ch2ch2hco+c6e3oA=c9e6oAojD	3.33E+10	0.0	6397.0
5651. ho2+pche4qH=DpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
5652. oh+pche4ojH=pche4qH	1.81E+13	0.0	0.0
5653. MeEc8e9oArD=pche4ojH	1.00E+08	0.9	5900.0
5654. ch2hco+p2c4h513=MeEc8e9oArD	1.32E+04	2.5	6130.0
5655. ho2+pche5qH=FpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
5656. ho2+pche6qI=GpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
5657. oh+pche6ojI=pche6qI	1.81E+13	0.0	0.0
5658. c4h6+Bc5oA=pche6ojI	2.64E+04	2.5	6130.0
5659. ho2+pche5qI=IpchqEqH	8.00E+10	0.0	6000.0
5660. oh+pche5ojI=pche5qI	1.81E+13	0.0	0.0
5661. Fc9e4oA=pche5ojI	1.00E+08	0.9	5900.0
5662. ch2ch2hco+c6h10-13=Fc9e4oA	1.32E+04	2.5	6130.0
5663. c7e4e6oA+c2h5=Fc9e4oA	1.32E+04	2.5	6130.0
5664. c7e4e6oA+oh=h2o+c7e4e6oyA	4.20E+12	0.0	500.0
5665. c7e4e6oA+h=h2+c7e4e6oyA	4.00E+13	0.0	4200.0
5666. c7e4e6oA+ho2=h2o2+c7e4e6oyA	1.00E+12	0.0	10000.0
5667. c7e4e6oyA=co+Fc6h9-13	2.00E+13	0.0	28700.0
5668. c3h6+BchxqAqC=BpchqEqI	8.80E+03	2.5	6130.0
5669. ho2+chxe1qC=BchxqAqC	8.00E+10	0.0	6000.0
5670. oh+c9e6oAqE=CpchqEqI	4.76E+07	1.5	34700.0
5671. oh+c9e6oAojE=c9e6oAqE	1.81E+13	0.0	0.0
5672. c3h6cho-1+c5e2oA=c9e6oAojE	3.33E+10	0.0	6397.0
5673. oh+MeEc8e1oIqD=GpchqEqI	4.76E+07	1.5	34700.0
5674. oh+MeEc8e1oIojD=MeEc8e1oIqD	1.81E+13	0.0	0.0
5675. ac3h5hco+Bc5oA=MeEc8e1oIojD	5.00E+10	0.0	9600.0
5676. ch2o+AechoE=pchoFojA	5.00E+10	0.0	3457.0
5677. Cchxone+c2h4=AechoE	1.32E+04	2.5	6130.0
5678. ch3hco+AmchoD=pchoFojB	3.33E+10	0.0	6397.0
5679. ethco+Cchxone=pchoFojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5680. c2h5+mchoAoD=pchoFojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5681. mchoAoD+oh=h2o+mchoyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
5682. mchoAoD+h=h2+mchoyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
5683. mchoAoD+ho2=h2o2+mchoyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
5684. mchoyAoD=co+Cchxone	2.00E+13	0.0	28700.0
5685. mchoyAoD+ho2=>oh+co2+Cchxone	2.00E+13	0.0	0.0
5686. nc3h7+chxoAoC=pchoFojD	2.50E+10	0.0	10090.0
5687. Ac9oDoF=pchoFojD	1.00E+08	0.9	5900.0
5688. Ac7oBoD+c2h4=Ac9oDoF	1.32E+04	2.5	6130.0
5689. ch2co+nc3h7coch2=Ac7oBoD	1.76E+04	2.5	6130.0
5690. chxoAoC+oh=BchxoAoC+h2o	7.80E+06	2.0	-765.0
5691. chxoAoC+h=BchxoAoC+h2	2.70E+07	2.0	5000.0
5692. chxoAoC+ho2=BchxoAoC+h2o2	1.20E+12	0.0	15500.0
5693. chxoAoC+oh=DchxoAoC+h2o	1.56E+07	2.0	-765.0
5694. chxoAoC+h=DchxoAoC+h2	5.40E+07	2.0	5000.0
5695. chxoAoC+ho2=DchxoAoC+h2o2	2.40E+12	0.0	15500.0
5696. BchxoAoC+o=c6oAoCoyF	2.00E+14	0.0	0.0
5697. BchxoAoC+ho2=oh+c6oAoCoyF	1.00E+13	0.0	0.0
5698. BchxoAoC+o2=co2+Ec5oAoB	1.23E+36	-7.2	33600.0
5699. c6oAoCoyF=co+Ec5oAoB	2.00E+13	0.0	28700.0
5700. c2h4+ch2cohco=Ec5oAoB	1.32E+04	2.5	6130.0
5701. Fc6e1oCoE=DchxoAoC	1.00E+08	0.9	5900.0
5702. ch2co+ch2coc2h3=Fc6e1oCoE	1.76E+04	2.5	6130.0
5703. MeEc8oyAoI=pchoFojE	1.00E+08	0.9	5900.0
5704. EtDc7oAoyI=pchoFojG	1.00E+08	0.9	5900.0
5705. pchoFojH=>Mec8oor	2.00E+13	0.0	9180.0
5706. EtDc7oBoIrA=pchoFojH	1.00E+08	0.9	5900.0
5707. c6e5oAoC+oh=c6e5oyAoC+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
5708. c6e5oAoC+h=c6e5oyAoC+h2	4.10E+09	1.2	2405.0
5709. c6e5oAoC+ho2=c6e5oyAoC+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
5710. c6e5oAoC+ch3=c6e5oyAoC+ch4	7.60E+00	3.4	3740.0
5711. c6e5oAoC+o2=c6e5oyAoC+ho2	3.00E+13	0.0	39200.0
5712. c6e5oyAoC=Ac5e4oB+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
5713. c6e5oyAoC+ho2=>Ac5e4oB+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5714. MeBc5oAoF+oh=>h2o+MeBc5oyAoF	4.20E+12	0.0	500.0
5715. MeBc5oAoF+h=>h2+MeBc5oyAoF	4.00E+13	0.0	4200.0
5716. MeBc5oAoF+ho2=>h2o2+MeBc5oyAoF	1.00E+12	0.0	10000.0
5717. MeBc5oyAoF=>co+acrol+c2h5	2.00E+13	0.0	28700.0
5718. MeBc5oyAoF+ho2=>oh+co2+acrol+c2h5	2.00E+13	0.0	0.0
5719. EtDc7oBoIrA=ch2co+ac3h5hco+nc3h7	2.00E+13	0.0	30400.0
5720. EtDc7oBoIrA=ch2co+c5h10+ch2hco	2.00E+13	0.0	30400.0
5721. Fc9oAoD=pchoFojI	1.00E+08	0.9	5900.0
5722. c5h10+choch2ch2co=Fc9oAoD	1.00E+11	0.0	9800.0
5723. c2h5+c7e6oAoD=Fc9oAoD	1.50E+11	0.0	7200.0
5724. c7e6oAoD+oh=c7e6oyAoD+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
5725. c7e6oAoD+h=c7e6oyAoD+h2	4.10E+09	1.2	2405.0
5726. c7e6oAoD+ho2=c7e6oyAoD+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
5727. c7e6oAoD+ch3=c7e6oyAoD+ch4	7.60E+00	3.4	3740.0
5728. c7e6oAoD+o2=c7e6oyAoD+ho2	3.00E+13	0.0	39200.0
5729. c7e6oyAoD=Ac6e5oC+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
5730. c7e6oyAoD+ho2=>Ac6e5oC+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5731. BpchqDqF=oh+c3h6+chxoAqC	5.00E+13	0.0	25500.0
5732. c2h4+AmchqBqD=ApchqDqF	1.32E+04	2.5	6130.0
5733. ho2+mche1qD=AmchqBqD	8.00E+10	0.0	6000.0
5734. oh+mche1ojD=mche1qD	1.81E+13	0.0	0.0
5735. MeEc6e5oArG=mche1ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
5736. MeCc6e7oArF=mche1ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
5737. ac3h4+c3h6cho-1=MeEc6e5oArG	1.76E+04	2.5	6130.0
5738. c2h4+MeCc4e3oArE=MeCc6e7oArF	8.50E+10	0.0	11300.0
5739. ch2hco+ac3h4=MeCc4e3oArE	1.76E+04	2.5	6130.0
5740. ho2+pche6qD=GpchqDqF	8.00E+10	0.0	6000.0
5741. oh+pche6ojD=pche6qD	1.81E+13	0.0	0.0
5742. chxe3oA+nc3h7=pche6ojD	2.50E+10	0.0	10090.0
5743. Ac9e2oF=pche6ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
5744. Ac9e3oF=pche6ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
5745. c4h6+nc3h7coch2=Ac9e2oF	2.64E+04	2.5	6130.0
5746. c2h4+Ac7e1oD=Ac9e3oF	2.00E+11	0.0	2010.0
5747. c2h2+nc3h7coch2=Ac7e1oD	7.77E+06	1.4	7755.0
5748. oh+c9e1oFqD=HpchqDqF	4.76E+07	1.5	34700.0
5749. oh+c9e1oFojD=c9e1oFqD	1.81E+13	0.0	0.0
5750. ac3h5hco+nc3h7coch2=c9e1oFojD	3.33E+10	0.0	6397.0
5751. ac3h5+c6oAoC=c9e1oFojD	5.00E+10	0.0	9600.0
5752. mche1qDqF+c2h5=DpchqFqH	1.32E+04	2.5	6130.0
5753. oh+MeEc8e9oAqC=DpchqFqH	4.76E+07	1.5	34700.0
5754. oh+mche1qDojF=mche1qDqF	1.81E+13	0.0	0.0
5755. MeEc6e5oAqCrG=mche1qDojF	1.00E+08	0.9	5900.0
5756. MeCc6e7oAqErF=mche1qDojF	1.00E+08	0.9	5900.0
5757. ac3h4+Dc4oAqC=MeEc6e5oAqCrG	1.76E+04	2.5	6130.0
5758. ho2+ac3h5hco=Dc4oAqC	8.00E+10	0.0	6000.0
5759. ho2+MeCc6e5e7oA=MeCc6e7oAqErF	8.00E+10	0.0	6000.0
5760. MeCc6e5e7oA+oh=MeCc6e5e7oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5761. MeCc6e5e7oA+h=MeCc6e5e7oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5762. MeCc6e5e7oA+ho2=MeCc6e5e7oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5763. MeCc6e5e7oyA=co+MeBc5e1e4rF	2.00E+13	0.0	28700.0
5764. MeCc6e5e7oyA+ho2=oh+co2+MeBc5e1e4rF	2.00E+13	0.0	0.0
5765. ac3h4+ac3h5=MeBc5e1e4rF	8.80E+03	2.5	6130.0
5766. oh+MeEc8e9oAojC=MeEc8e9oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
5767. hcoch2hco+MeBc5e1rF=MeEc8e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5768. ch2hco+MeCc6e7oA=MeEc8e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
5769. MeCc6e7oA+oh=MeCc6e7oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5770. MeCc6e7oA+h=MeCc6e7oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5771. MeCc6e7oA+ho2=MeCc6e7oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5772. MeCc6e7oyA=co+MeBc5e1rF	2.00E+13	0.0	28700.0
5773. MeCc6e7oyA+ho2=oh+co2+MeBc5e1rF	2.00E+13	0.0	0.0
5774. Ic9e3qFqH=CpchqFqH	1.00E+08	0.9	5900.0
5775. ho2+c9e1e6qD=Ic9e3qFqH	8.00E+10	0.0	6000.0
5776. oh+c9e1e6ojD=c9e1e6qD	1.81E+13	0.0	0.0
5777. ac3h5+c6e3oA=c9e1e6ojD	8.80E+03	2.5	6130.0
5778. ac3h5hco+Cc5h9-1=c9e1e6ojD	8.80E+03	2.5	6130.0
5779. c6e3oA+oh=c6e3oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5780. c6e3oA+h=c6e3oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5781. c6e3oA+ho2=c6e3oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5782. c6e3oyA=co+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	28700.0
5783. c6e3oyA+ho2=oh+co2+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	0.0
5784. ho2+pche5qH=EpchqFqH	8.00E+10	0.0	6000.0
5785. oh+pche5ojH=pche5qH	1.81E+13	0.0	0.0
5786. EtDc7e1oIrC=pche5ojH	1.00E+08	0.9	5900.0
5787. c7h12-13+ch2hco=EtDc7e1oIrC	1.32E+04	2.5	6130.0
5788. chxoAoD+nc3h7=pchoGojD	8.50E+10	0.0	11900.0
5789. Ac9oCoF=pchoGojD	1.00E+08	0.9	5900.0
5790. c7oyAoD+c2h4=Ac9oCoF	2.11E+11	0.0	7350.0
5791. Fc9oAoC=pchoGojE	1.00E+08	0.9	5900.0
5792. pchoGojE=>Mec8oor	2.00E+13	0.0	1670.0
5793. c5h10+ch2coch2hco=Fc9oAoC	1.50E+11	0.0	7200.0
5794. Fc9oAoC+o2=c9oAoCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5795. c9oAoCqjF=Dc9oAoCqF	5.75E+08	1.0	22500.0
5796. Dc9oAoCqF+o2=c9oAoCqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
5797. c9oAoCqFqjD=oh+c9oAoCoFqD	2.88E+08	1.0	23000.0
5798. c9oAoCoFqD=oh+hcoch2co+c6oAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
5799. c6oAoC+oh=>h2o+c6oyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
5800. c6oAoC+h=>h2+c6oyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0

5801. c6oAoC+ho2=>h2o2+c6oyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
5802. c6oyAoC=>co+nc3h7coch2	2.00E+13	0.0	28700.0
5803. c6oyAoC+ho2=>oh+co2+nc3h7coch2	2.00E+13	0.0	0.0
5804. c2h5+acrol=Bc5oA	1.50E+11	0.0	7200.0
5805. EtDc7oyAoI=pchoGojF	1.00E+08	0.9	5900.0
5806. Ipc9oAoB=pchoGojF	1.00E+08	0.9	5900.0
5807. c5h10+c2h4cohco=Ipc9oAoB	1.50E+11	0.0	7200.0
5808. c2h4+choco=c2h4cohco	2.11E+11	0.0	7350.0
5809. nc3h7+c6e5oAoB=Ipc9oAoB	1.50E+11	0.0	7200.0
5810. pche4e6+oh=h2o+Ipche4e6	2.25E+13	0.0	2217.0
5811. pche4e6+oh=h2o+Dpche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
5812. pche5e7+oh=h2o+Ipche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
5813. pche5e7+oh=h2o+Dpche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
5814. pche4e6+h=h2+Ipche4e6	5.00E+13	0.0	3900.0
5815. pche4e6+h=h2+Dpche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
5816. pche5e7+h=h2+Ipche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
5817. pche5e7+h=h2+Dpche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
5818. pche4e6+ho2=h2o2+Ipche4e6	3.20E+12	0.0	14900.0
5819. pche4e6+ho2=h2o2+Dpche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
5820. pche5e7+ho2=h2o2+Ipche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
5821. pche5e7+ho2=h2o2+Dpche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
5822. pche4e6+o2=ho2+Ipche4e6	4.00E+12	0.0	40000.0
5823. pche4e6+o2=ho2+Dpche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
5824. pche5e7+o2=ho2+Ipche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
5825. pche5e7+o2=ho2+Dpche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
5826. pche4e6+ch3=ch4+Ipche4e6	1.00E+11	0.0	7300.0
5827. pche4e6+ch3=ch4+Dpche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
5828. pche5e7+ch3=ch4+Ipche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
5829. pche5e7+ch3=ch4+Dpche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
5830. Ipche4e6=pbz+h	1.20E+13	0.0	22800.0
5831. Dpche5e7=pbz+h	1.20E+13	0.0	20000.0
5832. Ipche5e7=pbz+h	6.00E+12	0.0	20000.0
5833. Ipche5e7=c6h6+nc3h7	2.00E+13	0.0	8800.0
5834. Ipche4e6+h=pbz+h2	3.16E+13	0.0	0.0
5835. Dpche5e7+h=pbz+h2	3.16E+13	0.0	0.0
5836. Ipche5e7+h=pbz+h2	3.16E+13	0.0	0.0
5837. Ipche4e6+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
5838. Dpche5e7+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
5839. Ipche5e7+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
5840. Ipche4e6+o=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5841. Dpche5e7+o=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5842. Ipche5e7+o=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
5843. Ipche4e6+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
5844. Dpche5e7+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
5845. Ipche5e7+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
5846. Ipche4e6+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
5847. Dpche5e7+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
5848. Ipche5e7+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
5849. Ipche4e6+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
5850. Dpche5e7+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
5851. Ipche5e7+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
5852. Ipche4e6+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
5853. Dpche5e7+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
5854. Ipche5e7+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
5855. Ipche4e6+nc3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
5856. Dpche5e7+nc3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
5857. Ipche5e7+nc3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
5858. Ipche4e6+ic3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
5859. Dpche5e7+ic3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
5860. Ipche5e7+ic3h7=pbz+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
5861. Ipche4e6+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
5862. Dpche5e7+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
5863. Ipche5e7+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
5864. Ipche4e6+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
5865. Dpche5e7+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
5866. Ipche5e7+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
5867. Ipche4e6+pchA=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5868. Dpche5e7+pchA=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5869. Ipche5e7+pchA=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5870. Ipche4e6+pchB=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5871. Dpche5e7+pchB=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5872. Ipche5e7+pchB=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5873. Ipche4e6+pchC=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5874. Dpche5e7+pchC=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5875. Ipche5e7+pchC=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5876. Ipche4e6+pchD=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5877. Dpche5e7+pchD=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5878. Ipche5e7+pchD=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5879. Ipche4e6+pchE=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5880. Dpche5e7+pchE=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5881. Ipche5e7+pchE=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5882. Ipche4e6+pchF=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5883. Dpche5e7+pchF=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5884. Ipche5e7+pchF=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5885. Ipche4e6+pchG=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5886. Dpche5e7+pchG=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5887. Ipche5e7+pchG=pbz+pch	3.98E+12	0.0	0.0
5888. Ipche4e6+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5889. Dpche5e7+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5890. Ipche5e7+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5891. Ipche4e6+c2h5o2=pbz+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5892. Dpche5e7+c2h5o2=pbz+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5893. Ipche5e7+c2h5o2=pbz+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5894. Ipche4e6+nc3h7o2=pbz+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5895. Dpche5e7+nc3h7o2=pbz+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5896. Ipche5e7+nc3h7o2=pbz+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
5897. Ipche4e6+pchqjA=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5898. Dpche5e7+pchqjA=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5899. Ipche5e7+pchqjA=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5900. Ipche4e6+pchqjB=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5901. Dpche5e7+pchqjB=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5902. Ipche5e7+pchqjB=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5903. Ipche4e6+pchqjC=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5904. Dpche5e7+pchqjC=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5905. Ipche5e7+pchqjC=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5906. Ipche4e6+pchqjD=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5907. Dpche5e7+pchqjD=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5908. Ipche5e7+pchqjD=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5909. Ipche4e6+pchqjE=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5910. Dpche5e7+pchqjE=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5911. Ipche5e7+pchqjE=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5912. Ipche4e6+pchqjF=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5913. Dpche5e7+pchqjF=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5914. Ipche5e7+pchqjF=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5915. Ipche4e6+pchqjG=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5916. Dpche5e7+pchqjG=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5917. Ipche5e7+pchqjG=pbz+pchqG	2.66E+11	0.0	11269.0
5918. ac3h5+ch3co=c5e4oB	1.00E+13	0.0	0.0
5919. c5e4oB+o2=Cc5e4oB+ho2	7.00E+10	0.0	36015.0
5920. c5e4oB+oh=Cc5e4oB+h2o	7.70E+05	2.2	622.0
5921. c5e4oB+h=Cc5e4oB+h2	7.00E+06	2.0	0.0
5922. c5e4oB+ho2=Cc5e4oB+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
5923. c5e4oB+ch3=Cc5e4oB+ch4	2.00E+14	0.0	22800.0
5924. Cc5e4oB+o=ch3cocho+c2h3	2.00E+14	0.0	0.0
5925. Cc5e4oB+o=ch3co+acrol	2.00E+14	0.0	0.0
5926. Cc5e4oB+ho2=ch3cocho+c2h3+oh	1.00E+13	0.0	0.0
5927. Cc5e4oB+ho2=ch3co+acrol+oh	1.00E+13	0.0	0.0
5928. c5e4oB+o2=Ac5e4oB+ho2	3.02E+13	0.0	48500.0
5929. c5e4oB+oh=Ac5e4oB+h2o	3.38E+07	1.7	830.0
5930. c5e4oB+h=Ac5e4oB+h2	1.15E+05	2.7	6260.0
5931. c5e4oB+ho2=Ac5e4oB+h2o2	8.50E+12	0.0	20460.0
5932. c5e4oB+ch3=Ac5e4oB+ch4	1.98E+11	0.0	9784.0
5933. c7e6oyA+ho2=>co2+oh+Fc6h11-1	2.00E+13	0.0	0.0
5934. Fc9oAoG+o2=c9oAoGqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
5935. c9oAoGqjF=Hc9oAoGqF	5.75E+08	1.0	22600.0
5936. Hc9oAoGqF+o2=c9oAoGqFqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
5937. c9oAoGqFqjH=oh+c9oAoGoFqH	2.88E+08	1.0	20600.0
5938. c9oAoGoFqH=>oh+ch3hco+c7oyAoBoG	1.00E+16	0.0	43000.0
5939. c7oyAoBoG=>co+c6oyAoF	2.00E+13	0.0	28700.0
5940. c7oyAoBoG+ho2=>co2+oh+c6oyAoF	2.00E+13	0.0	0.0
5941. c6oyAoF=>co+Ec5oA	2.00E+13	0.0	28700.0
5942. c6oyAoF+ho2=>co2+oh+Ec5oA	2.00E+13	0.0	0.0
5943. c2h4+ch2ch2hco=Ec5oA	3.30E+11	0.0	7200.0
5944. Ec5oA+o2=c5oAqjE	4.82E+36	-8.2	5167.0
5945. c5oAqjE=Cc5oAqE	5.75E+08	1.0	25000.0
5946. c5oAqjE=Bc5oAqE	9.89E+07	1.0	20000.0
5947. Cc5oAqE=>oh+ch2o+ac3h5hco	2.00E+13	0.0	28700.0
5948. Cc5oAqE+o2=c5oAqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5949. Bc5oAqE+o2=c5oAqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
5950. c5oAqEqjC=oh+c5oAoEqC	2.88E+08	1.0	23000.0
5951. c5oAqEqjB=oh+c5oAoEqB	4.94E+07	1.0	18000.0
5952. c5oAoEqC=>oh+hcoch2hco+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5953. c5oAoEqB=>oh+hco+choch2ch2cho	1.00E+16	0.0	43000.0
5954. ch2co+cyc6h11=AechoB	2.11E+11	0.0	7350.0
5955. c6oAoCoF+oh=>h2o+c6oyAoCoF	4.20E+12	0.0	500.0
5956. c6oAoCoF+h=>h2+c6oyAoCoF	4.00E+13	0.0	4200.0
5957. c6oAoCoF+ho2=>h2o2+c6oyAoCoF	1.00E+12	0.0	10000.0
5958. c6oyAoCoF=>co+Ec5oAoD	2.00E+13	0.0	28700.0
5959. c6oyAoCoF+ho2=>oh+co2+Ec5oAoD	2.00E+13	0.0	0.0
5960. c6oAoCoF+oh=>h2o+c6oAoCoyF	4.20E+12	0.0	500.0
5961. c6oAoCoF+h=>h2+c6oAoCoyF	4.00E+13	0.0	4200.0
5962. c6oAoCoF+ho2=>h2o2+c6oAoCoyF	1.00E+12	0.0	10000.0
5963. c6oAoCoyF=>co+Ec5oAoC	2.00E+13	0.0	28700.0
5964. c6oAoCoyF+ho2=>oh+co2+Ec5oAoC	2.00E+13	0.0	0.0
5965. c2h4+hcoch2co=Ec5oAoC	2.11E+11	0.0	7350.0
5966. Cc6oAoD=c2h5coc2h3+hco	2.00E+13	0.0	33800.0
5967. MeCc6oAoDoG+oh=>h2o+MeCc6oyAoDoG	4.20E+12	0.0	500.0
5968. MeCc6oAoDoG+h=>h2+MeCc6oyAoDoG	4.00E+13	0.0	4200.0
5969. MeCc6oAoDoG+ho2=>h2o2+MeCc6oyAoDoG	1.00E+12	0.0	10000.0
5970. MeCc6oyAoDoG=>co+MeBc5oAoCrF	2.00E+13	0.0	28700.0
5971. MeCc6oyAoDoG+ho2=>oh+co2+MeBc5oAoCrF	2.00E+13	0.0	0.0
5972. MeCc6oAoDoG+oh=>h2o+MeCc6oAoDoyG	4.20E+12	0.0	500.0
5973. MeCc6oAoDoG+h=>h2+MeCc6oAoDoyG	4.00E+13	0.0	4200.0
5974. MeCc6oAoDoG+ho2=>h2o2+MeCc6oAoDoyG	1.00E+12	0.0	10000.0
5975. MeCc6oAoDoyG=>co+Cc6oAoD	2.00E+13	0.0	28700.0
5976. MeCc6oAoDoyG+ho2=>oh+co2+Cc6oAoD	2.00E+13	0.0	0.0
5977. acrol+c2h5co=MeBc5oAoCrF	2.11E+11	0.0	7350.0
5978. hco+c2h5coc2h3=MeBc5oAoCrF	2.11E+11	0.0	7350.0
5979. c7e6oAoC+oh=c7e6oyAoC+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5980. c7e6oAoC+h=c7e6oyAoC+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5981. c7e6oAoC+ho2=c7e6oyAoC+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
5982. c7e6oyAoC=Ac6e5oB+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5983. c7e6oyAoC+ho2=>Ac6e5oB+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
5984. Ac9oDoF+o2=c9oDoFqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
5985. c9oDoFqjA=Cc9oDoFqA	5.75E+08	1.0	22600.0
5986. Cc9oDoFqA+o2=c9oDoFqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
5987. c9oDoFqAqjC=oh+c9oAoDoFqC	5.75E+08	1.0	26000.0
5988. c9oAoDoFqC=oh+hcoch2hco+c6oyAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
5989. ho2+pche5qD=FpchqDqE	8.00E+10	0.0	6000.0
5990. pche5qD=pche5ojD+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
5991. oh+c9e1qAoF=FpchqDqE	4.76E+07	1.5	34700.0
5992. c9e1qAoF=c9e1ojAoF+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
5993. Ac6oC+acrol=c9e1ojAoF	1.32E+04	2.5	6130.0
5994. c5e4oB+oh=Dc5oBohE	9.93E+11	0.0	-960.0
5995. Dc5oBohE+o2=c5oBqjDohE	1.20E+11	0.0	-1100.0
5996. c5oBqjDohE=c4oAoC+ch2o+oh	1.25E+10	0.0	18900.0
5997. c4oAoC+oh=c4oyAoC+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
5998. c4oAoC+h=c4oyAoC+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
5999. c4oAoC+ho2=c4oyAoC+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6000. c4oyAoC=ch2coch3+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6001. c4oyAoC+ho2=>ch2coch3+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6002. ch2co+mchA=ApchoB	1.76E+04	2.5	6130.0
6003. acrol+cyc6h11=BpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
6004. c2h4+chxco=ApchoC	1.00E+11	0.0	7800.0
6005. hco+echel=CpchoA	1.00E+11	0.0	7800.0
6006. c4h6+hco=Cc5e4oA	1.00E+11	0.0	7800.0
6007. mchel+ch2hco=DpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
6008. c2h4+AmchoC=ApchoE	1.32E+04	2.5	6130.0
6009. cyc6h10+ch2ch2hco=EpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
6010. c2h4+AmchoD=ApchoF	1.32E+04	2.5	6130.0
6011. EtDc7e6oArI=FpchoA	1.00E+08	0.9	5900.0
6012. ch2hco+c7h12-16=Dc9e8oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6013. c4h7hco-1+Dc4h7-1=Dc9e8oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6014. c2h4+Dc7e6oA=EtDc7e6oArI	1.32E+04	2.5	6130.0
6015. c5h8-14+ch2hco=Dc7e6oA	1.32E+04	2.5	6130.0
6016. ch3chco+cyc6h11=BpchoC	1.76E+04	2.5	6130.0
6017. Ic9e3oB=CpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
6018. c2h4+Gc7e3oB=Ic9e3oB	1.32E+04	2.5	6130.0
6019. c2h4+Cc5e4oB=Gc7e3oB	8.80E+03	2.5	6130.0
6020. ch3co+mche1=DpchoB	1.00E+11	0.0	7800.0
6021. c3h6+Bchxone=BpchoE	8.80E+03	2.5	6130.0
6022. ch2coch3+cyc6h10=EpchoB	8.80E+03	2.5	6130.0
6023. c2h4+Bc5e4oB=Gc7e4oB	2.00E+11	0.0	2010.0
6024. c3h6+Cchxone=BpchoF	2.64E+04	2.5	6130.0
6025. Dc9e8oB=FpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
6026. EtDc7e6oBrI=FpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
6027. ch3co+c7h12-16=Dc9e8oB	2.00E+11	0.0	7800.0
6028. c5e4oB+Dc4h7-1=Dc9e8oB	1.32E+04	2.5	6130.0

6029. c2h4+Dc7e6oB=EtDc7e6oBrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6030. c5h8-14+ch3co=Dc7e6oB	1.00E+11	0.0	7800.0
6031. c5e4oB+c2h3=Dc7e6oB	2.00E+11	0.0	2010.0
6032. c3h6+Dchxone=BpchoG	2.64E+04	2.5	6130.0
6033. MeDc8e7oBrI=GpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
6034. c5e4oB+Dc4h7-1=MeDc8e7oBrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6035. ch2coch3+c6h10-15=MeDc8e7oBrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6036. MeDc8e9oCrH=DpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
6037. c2h4+MeCc6e7oDrA=MeDc8e9oCrH	1.32E+04	2.5	6130.0
6038. c2h4+Bc5e1oC=MeCc6e7oDrA	2.00E+11	0.0	2010.0
6039. c2h5+ch2cco=Bc5e1oC	1.76E+04	2.5	6130.0
6040. c9e6oyA=CpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
6041. c9e6oyA=co+Hc8h15-3	2.00E+13	0.0	28700.0
6042. c2h4+Ac6h11-3=Hc8h15-3	1.32E+04	2.5	6130.0
6043. cyc6h10+c2h5co=EpchoC	1.00E+11	0.0	7800.0
6044. ch3+echeloE=CpchoF	1.32E+04	2.5	6130.0
6045. Ac9e6oD=CpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
6046. c2h4+Ac7e4oB=Ac9e6oD	8.80E+03	2.5	6130.0
6047. ch2co+Cc5h9-1=Ac7e4oB	8.80E+03	2.5	6130.0
6048. EtDc7e6oCrI=FpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
6049. Dc9e8oC=FpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
6050. Dc7e1oE+c2h4=EtDc7e6oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6051. c2h5coc2h3+c2h3=Dc7e1oE	4.00E+11	0.0	2010.0
6052. c2h5coc2h3+Dc4h7-1=Dc9e8oC	1.32E+04	2.5	6130.0
6053. ch3+echeloF=CpchoG	1.32E+04	2.5	6130.0
6054. MeDc8e7oCrI=GpchoC	1.00E+08	0.9	5900.0
6055. c2h5coc2h3+Dc4h7-1=MeDc8e7oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6056. c6h10-15+c2h5co=MeDc8e7oCrI	1.00E+11	0.0	7800.0
6057. mche1oC+c2h5=DpchoE	1.32E+04	2.5	6130.0
6058. MeEc8e9oyA=DpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
6059. ac3h4+nc3h7=MeBc5e1rF	2.00E+11	0.0	11300.0
6060. MeBc5e1rF+o2=ch2o+nc3h7cooch2	3.08E+09	0.4	16910.0
6061. MeEc8e9oyA=co+MeDc7e8rA	2.00E+13	0.0	28700.0
6062. MeEc8e9oyA+ho2=co2+oh+MeDc7e8rA	2.00E+13	0.0	0.0
6063. c2h4+MeBc5e1rF=MeDc7e8rA	8.80E+03	2.5	6130.0
6064. mche1oE+c2h5=DpchoG	1.32E+04	2.5	6130.0
6065. chxe2oA+nc3h7=EpchoF	1.32E+04	2.5	6130.0
6066. EtDc7e1oCrI=FpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
6067. c2h4+Dc7e1oC=EtDc7e1oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6068. divinket+c2h5=Dc7e1oC	2.64E+04	2.5	6130.0
6069. chxe3oA+nc3h7=EpchoG	1.32E+04	2.5	6130.0
6070. MeEc8e1oyI=GpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
6071. MeEc8e1oyI=co+Ec8h15-1	2.00E+13	0.0	28700.0
6072. ac3h5+c5h10=Ec8h15-1	8.80E+03	2.5	6130.0
6073. c2h5+c6h10-15=Ec8h15-1	1.32E+04	2.5	6130.0
6074. chxe3oA+nc3h7=EpchoH	1.32E+04	2.5	6130.0
6075. EtDc7e1oHrI=HpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
6076. Fc9e1oE=HpchoE	1.00E+08	0.9	5900.0
6077. c7e1e6oC+c2h5=Fc9e1oE	1.32E+04	2.5	6130.0
6078. c3h7chco+Dc4h7-1=Fc9e1oE	1.76E+04	2.5	6130.0
6079. ch2co+Dc7h13-1=EtDc7e1oHrI	1.76E+04	2.5	6130.0
6080. c2h5+c5h8-14=Dc7h13-1	5.28E+04	2.5	6130.0
6081. chxe2oA+nc3h7=IpchoE	1.32E+04	2.5	6130.0
6082. Fc9e1oC=FpchoG	1.00E+08	0.9	5900.0
6083. ch2coc2h3+c5h10=Fc9e1oC	8.80E+03	2.5	6130.0
6084. c7e1e6oC+c2h5=Fc9e1oC	1.32E+04	2.5	6130.0
6085. MeEc8e1oCrI=GpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
6086. ch2coc2h3+c5h10=MeEc8e1oCrI	8.80E+03	2.5	6130.0
6087. c6e1e5oC+nc3h7=MeEc8e1oCrI	1.32E+04	2.5	6130.0
6088. EtDc7e1oyI=HpchoF	1.00E+08	0.9	5900.0
6089. EtDc7e1oyI=co+MeDc7e1rH	2.00E+13	0.0	28700.0
6090. nc3h7+c5h8-14=MeDc7e1rH	2.64E+04	2.5	6130.0
6091. ac3h5+c5h10=MeDc7e1rH	8.80E+03	2.5	6130.0
6092. ho2+pche3qF=CpchqDqF	8.00E+10	0.0	6000.0
6093. Etall+c3h6cho-1=MeEc8e5oArI	1.76E+04	2.5	6130.0
6094. ch3co+Etall=MeCc6e3oArG	1.76E+04	2.5	6130.0
6095. Etall+ho2=oh+ch2o+c4h6	5.00E+11	0.0	19000.0
6096. Etall+ho2=oh+ch2co+c3h6	5.00E+11	0.0	19000.0
6097. Etall+ho2=oh+ethco+c2h2	5.00E+11	0.0	19000.0
6098. ho2+pche4qB=EpchqDqB	8.00E+10	0.0	6000.0
6099. c6e2e5oA+oh=c6e2e5oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
6100. c6e2e5oA+h=c6e2e5oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
6101. c6e2e5oA+ho2=c6e2e5oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
6102. c6e2e5oyA=c2h2+ac3h5+co	2.00E+13	0.0	28700.0
6103. c6e2e5oyA+ho2=>c2h2+ac3h5+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
6104. mche1oE+oh=ch2o+Dchxone	1.40E+12	0.0	-900.0
6105. mche1oE+oh=ch3+chxoAoD	1.40E+12	0.0	-900.0
6106. eche1e3+oh=ch2o+Cmche1	1.40E+12	0.0	-900.0
6107. eche1e3+oh=ch3+mche2oA	1.40E+12	0.0	-900.0
6108. eche1e3+oh=2c2h4+ch2coc2h3	1.40E+12	0.0	-900.0
6109. eche1e3+oh=c4h6+c3h6cho-1	1.40E+12	0.0	-900.0
6110. AmchoC=>co+Fc6h11-1	1.78E+16	-0.4	25157.0
6111. AmchoC=>2c2h4+c2h3co	3.31E+15	-0.1	24999.0
6112. c3h3+c3h3=c6h615	4.00E+12	0.0	0.0
6113. c6h5+o=c5h5+co	9.00E+13	0.0	0.0
6114. c6h5+o2=c6h5o2	1.86E+13	-0.2	-711.0
6115. c6h5o+o=c6h5o2	2.81E+13	-0.2	-1935.0
6116. c6h5+c3h6=ac3h5+c6h6	1.36E+00	3.8	1437.0
6117. c6h5oh=CPD+co	8.62E+15	-0.6	74122.6
6118. c6h5o+o=c6h4o2+h	3.00E+13	0.0	0.0
6119. c6h5o2+h=c6h5o2h	2.50E+14	0.0	0.0
6120. c6h5o+oh=c6h5o2h	1.00E+12	0.0	0.0
6121. c6h5o2+ho2=c6h5o2h+o2	1.87E+12	0.0	1540.0
6122. c6h5o2+c6h5oh=c6h5o2h+c6h5o	1.00E+12	0.0	6961.0
6123. c6h5o+ho2=c6h5o2+oh	1.50E+14	0.0	23650.0
6124. c6h4o2=c5h4+co2	3.50E+12	0.0	67000.0
6125. c6h4o2+h=>c5h5o+co	2.50E+13	0.0	4700.0
6126. c6h4o2+h=>c6h3o2+h2	2.00E+12	0.0	8100.0
6127. c6h4o2+oh=>c6h3o2+h2o	1.00E+06	2.0	4000.0
6128. c6h4o2+o=>c6h3o3+h	1.50E+13	0.0	4530.0
6129. c6h4o2+o=>c6h3o2+oh	1.40E+13	0.0	14700.0
6130. c6h3o2+h=>c2h2+c2h2+co+co	1.00E+14	0.0	0.0
6131. c6h3o2+o=>c2h2+hcco+co+co	1.00E+14	0.0	0.0
6132. c6h3o3=>c2h2+hcco+co+co	1.00E+12	0.0	50000.0
6133. bmepral=ic3h7+hco	2.45E+16	0.0	84128.0
6134. bmepral+o2=>bmepryl+ho2	3.01E+13	0.0	39148.0
6135. bmepral+ho2=>bmepryl+h2o2	3.01E+12	0.0	11923.0
6136. bmepral+oh=>bmepryl+h2o	3.37E+12	0.0	-616.0
6137. bmepral+o=>bmepryl+oh	5.00E+12	0.0	1792.0
6138. bmepral+h=>bmepryl+h2	4.00E+13	0.0	4207.0
6139. bmepryl+M=>ic3h7+co+M	8.64E+15	0.0	14400.0
6140. bme1bu=bme2bu	3.50E+12	0.0	60000.0
6141. bme1bu=tc3h5+c2h5	3.30E+21	-1.2	97720.0
6142. bme1bu=bme2b1+h	4.08E+18	-1.0	97350.0
6143. bme1bu+o2=bme2b1+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
6144. bme1bu+ho2=bme2b1+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
6145. bme1bu+oh=bme2b1+h2o	6.28E+06	2.0	-543.0
6146. bme1bu+o=bme2b1+oh	1.30E+12	0.0	4500.0
6147. bme1bu+h=bme2b1+h2	1.95E+13	0.0	4445.0
6148. bme1bu+ch3=bme2b1+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
6149. bme2bu=bme2b1+h	2.13E+47	-9.3	104551.0
6150. bme2bu=cme2b1+h	1.06E+47	-9.3	104551.0
6151. bme2bu+o2=bme2b1+ho2	4.80E+12	0.0	38530.0
6152. bme2bu+o2=cme2b1+ho2	2.40E+12	0.0	38530.0
6153. bme2bu+ho2=bme2b1+h2o2	3.00E+11	0.0	14190.0
6154. bme2bu+ho2=cme2b1+h2o2	1.50E+11	0.0	14190.0
6155. bme2bu+oh=bme2b1+h2o	9.00E+06	2.0	-60.0
6156. bme2bu+oh=cme2b1+h2o	3.00E+06	2.0	-60.0
6157. bme2bu+oh=ch3hco+ic3h7	2.00E+10	0.0	4000.0
6158. bme2bu+o=bme2b1+oh	3.50E+11	0.7	5884.0
6159. bme2bu+o=cme2b1+oh	1.75E+11	0.7	5884.0
6160. bme2bu+o=ch3hco+c3h6	7.23E+05	2.3	-1050.0
6161. bme2bu+h=bme2b1+h2	1.29E+13	0.0	4445.0
6162. bme2bu+h=cme2b1+h2	6.46E+12	0.0	4445.0
6163. bme2bu+ch3=bme2b1+ch4	3.20E+11	0.0	8800.0
6164. bme2bu+ch3=cme2b1+ch4	1.60E+11	0.0	8800.0
6165. bme2b1=isope+h	1.20E+08	2.5	45000.0
6166. bme2b1+o2=isope+ho2	1.00E+11	0.0	37000.0
6167. bme2b1+ho2=isope+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
6168. bme2b1+oh=isope+h2o	1.80E+13	0.0	0.0
6169. bme2b1+o=isope+oh	1.80E+13	0.0	0.0
6170. bme2b1+h=isope+h2	3.60E+12	0.0	0.0
6171. bme2b1+ch3=isope+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
6172. bme2b1+ic4h7=isope+ic4h8	4.00E+13	0.0	0.0
6173. cme2b1=isope+h	1.20E+08	2.5	45000.0
6174. cme2b1+o2=isope+ho2	1.00E+11	0.0	37000.0
6175. cme2b1+ho2=isope+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
6176. cme2b1+oh=isope+h2o	1.80E+13	0.0	0.0
6177. cme2b1+o=isope+oh	1.80E+13	0.0	0.0
6178. cme2b1+h=isope+h2	3.60E+12	0.0	0.0
6179. cme2b1+ch3=isope+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
6180. cme2b1+ic4h7=isope+ic4h8	4.00E+13	0.0	0.0
6181. c2h3+tc3h5=isope	2.50E+13	0.0	0.0
6182. c4h7o=tc3h5+ch2o	5.00E+15	0.0	25000.0
6183. c4h7o=ac3h5+ch2o	1.50E+15	0.0	25000.0
6184. ic4h8+ch3=bme1bu+h	1.55E+07	1.9	14182.0
6185. bme1bu+h=c3h6+c2h5	1.70E+12	0.0	2900.0
6186. bme1bu+ch3=>c2h4+c2h4+c2h5	1.70E+11	0.0	7400.0
6187. nec5h11=ch3+ic4h8	7.94E+13	0.0	30900.0
6188. nec5h11+ho2=>tc4h9+ch2o+oh	2.50E+13	0.0	0.0
6189. nec5h11+o=>tc4h9+ch2o	5.00E+13	0.0	0.0
6190. nec5h11+oh=>tc4h9+ch2o+h	2.50E+13	0.0	0.0
6191. nec5h11+ch3=>tc4h9+c2h5	1.00E+11	0.0	0.0
6192. tc3h5+ch2=c4h6+h	3.00E+13	0.0	0.0
6193. ic8h18=nec5h11+ic3h7	1.00E+17	0.0	83200.0
6194. ic8h18=dddmpe2+ch3	2.00E+17	0.0	81500.0
6195. ic8h18=tc4h9+ic4h9	1.00E+17	0.0	79000.0
6196. ic8h18=bddmpe2+ch3	3.00E+17	0.0	80800.0
6197. ic8h18=bbdtmpe1+h	2.00E+16	0.0	100160.0
6198. ic8h18=bbdtmpe3+h	4.40E+15	0.0	95160.0
6199. ic8h18=bddtmpe2+h	2.20E+15	0.0	92760.0
6200. ic8h18=bddtmpe1+h	1.30E+16	0.0	99160.0
6201. ic8h18+o2=bbdtmpe1+ho2	3.75E+13	0.0	50560.0
6202. ic8h18+o2=bbdtmpe3+ho2	2.00E+13	0.0	45600.0
6203. ic8h18+o2=bddtmpe2+ho2	2.00E+13	0.0	43200.0
6204. ic8h18+o2=bddtmpe1+ho2	2.50E+13	0.0	49600.0
6205. ic8h18+ho2=bbdtmpe1+h2o2	1.20E+13	0.0	19400.0
6206. ic8h18+ho2=bbdtmpe3+h2o2	2.44E+12	0.0	17000.0
6207. ic8h18+ho2=bddtmpe2+h2o2	2.16E+12	0.0	14400.0
6208. ic8h18+ho2=bddtmpe1+h2o2	8.04E+12	0.0	19400.0
6209. ic8h18+oh=bbdtmpe1+h2o	2.63E+07	1.8	278.2
6210. ic8h18+oh=bbdtmpe3+h2o	1.34E+06	2.0	-1132.0
6211. ic8h18+oh=bddtmpe2+h2o	1.70E+06	1.9	-1451.0
6212. ic8h18+oh=bddtmpe1+h2o	1.78E+07	1.8	1431.0
6213. ic8h18+o=bbdtmpe1+oh	1.24E+03	3.5	3092.1
6214. ic8h18+o=bbdtmpe3+oh	1.13E+03	3.3	1653.3
6215. ic8h18+o=bddtmpe2+oh	2.51E+08	1.1	1631.5
6216. ic8h18+o=bddtmpe1+oh	8.28E+02	3.5	3092.1
6217. ic8h18+h=bbdtmpe1+h2	8.40E+07	2.0	7700.0
6218. ic8h18+h=bbdtmpe3+h2	9.10E+06	2.0	5000.0
6219. ic8h18+h=bddtmpe2+h2	5.00E+13	0.0	7300.0
6220. ic8h18+h=bddtmpe1+h2	5.60E+07	2.0	7700.0
6221. ic8h18+ch3=bbdtmpe1+ch4	1.95E+12	0.0	11600.0
6222. ic8h18+ch3=bbdtmpe3+ch4	4.00E+11	0.0	9500.0
6223. ic8h18+ch3=bddtmpe2+ch4	1.00E+11	0.0	7900.0
6224. ic8h18+ch3=bddtmpe1+ch4	1.30E+12	0.0	11600.0
6225. ic8h18+c2h5=bbdtmpe1+c2h6	1.50E+11	0.0	13400.0
6226. ic8h18+c2h5=bbdtmpe3+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
6227. ic8h18+c2h5=bddtmpe2+c2h6	1.00E+11	0.0	7900.0
6228. ic8h18+c2h5=bddtmpe1+c2h6	1.00E+11	0.0	13400.0
6229. ic8h18+c2h3=bbdtmpe1+c2h4	1.50E+12	0.0	18000.0
6230. ic8h18+c2h3=bbdtmpe3+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
6231. ic8h18+c2h3=bddtmpe2+c2h4	2.00E+11	0.0	14300.0
6232. ic8h18+c2h3=bddtmpe1+c2h4	1.00E+12	0.0	18000.0
6233. ic8h18+tc3h5=bbdtmpe1+c3h6	1.50E+12	0.0	18000.0
6234. ic8h18+tc3h5=bbdtmpe3+c3h6	4.00E+11	0.0	16800.0
6235. ic8h18+tc3h5=bddtmpe2+c3h6	2.00E+11	0.0	14300.0
6236. ic8h18+tc3h5=bddtmpe1+c3h6	1.00E+12	0.0	18000.0
6237. ic8h18+ac3h5=bbdtmpe1+c3h6	1.50E+12	0.0	18000.0
6238. ic8h18+ac3h5=bbdtmpe3+c3h6	4.00E+11	0.0	16800.0
6239. ic8h18+ac3h5=bddtmpe2+c3h6	2.00E+11	0.0	14300.0
6240. ic8h18+ac3h5=bddtmpe1+c3h6	1.00E+12	0.0	18000.0
6241. ic8h18+ic4h7=bbdtmpe1+ic4h8	1.50E+12	0.0	18000.0
6242. ic8h18+ic4h7=bbdtmpe3+ic4h8	4.00E+11	0.0	16800.0
6243. ic8h18+ic4h7=bddtmpe2+ic4h8	2.00E+11	0.0	14300.0
6244. ic8h18+ic4h7=bddtmpe1+ic4h8	1.00E+12	0.0	18000.0
6245. ic8h18+pc4h9=bbdtmpe1+c4h10	1.50E+11	0.0	13400.0
6246. ic8h18+pc4h9=bbdtmpe3+c4h10	5.00E+10	0.0	10400.0
6247. ic8h18+pc4h9=bddtmpe2+c4h10	1.00E+11	0.0	7900.0
6248. ic8h18+pc4h9=bddtmpe1+c4h10	1.00E+11	0.0	13400.0
6249. ic8h18+ch3o=bbdtmpe1+ch3oh	4.75E+11	0.0	7000.0
6250. ic8h18+ch3o=bbdtmpe3+ch3oh	1.10E+12	0.0	5000.0
6251. ic8h18+ch3o=bddtmpe2+ch3oh	1.90E+10	0.0	2800.0
6252. ic8h18+ch3o=bddtmpe1+ch3oh	3.20E+11	0.0	7000.0
6253. dddmpe2=c3h6+tc4h9	5.00E+12	0.0	28400.0
6254. dddmpe2=dddm1pe+h	3.00E+13	0.0	35350.0
6255. dddmpe2=dddm2pe+h	3.00E+13	0.0	38500.0
6256. dddmpe2+o2=dddm1pe+ho2	2.00E+12	0.0	5000.0

6257. dddmpe2+o2=dddm2pe+ho2 2.00E+12 0.0 5000.0
6258. dddmpe2+ho2=dddm1pe+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
6259. dddmpe2+ho2=dddm2pe+h2o2 1.00E+12 0.0 2000.0
6260. dddmpe2+oh=dddm1pe+h2o 1.20E+13 0.0 0.0
6261. dddmpe2+oh=dddm2pe+h2o 2.40E+13 0.0 0.0
6262. dddmpe2+o=dddm1pe+oh 3.33E+13 0.0 0.0
6263. dddmpe2+o=dddm2pe+oh 5.00E+13 0.0 0.0
6264. dddmpe2+h=dddm1pe+h2 5.00E+13 0.0 0.0
6265. dddmpe2+h=dddm2pe+h2 5.00E+13 0.0 0.0
6266. dddmpe2+ch3=dddm1pe+ch4 8.00E+11 0.0 0.0
6267. dddmpe2+ch3=dddm2pe+ch4 1.00E+12 0.0 0.0
6268. dddmpe2+c2h3=dddm1pe+c2h4 1.60E+12 0.0 0.0
6269. dddmpe2+c2h3=dddm2pe+c2h4 1.00E+12 0.0 0.0
6270. dddmpe2+c2h5=dddm1pe+c2h6 1.60E+12 0.0 0.0
6271. dddmpe2+c2h5=dddm2pe+c2h6 1.00E+12 0.0 0.0
6272. dddmpe2+ic4h7=dddm1pe+ic4h8 1.00E+12 0.0 0.0
6273. dddmpe2+ic4h7=dddm2pe+ic4h8 1.00E+12 0.0 0.0
6274. dddmpe2+Cc4h7-1=dddm1pe+c4h8 1.00E+12 0.0 0.0
6275. dddmpe2+Cc4h7-1=dddm2pe+c4h8 1.00E+12 0.0 0.0
6276. bddmpe2=ic4h8+ic3h7 5.00E+12 0.0 28400.0
6277. bddmpe2=bddm1pe+h 3.00E+13 0.0 37270.0
6278. bddmpe2=bddm2pe+h 3.00E+13 0.0 34800.0
6279. bddmpe2+o2=bddm1pe+ho2 2.00E+12 0.0 5000.0
6280. bddmpe2+o2=bddm2pe+ho2 2.00E+12 0.0 5000.0
6281. bddmpe2+ho2=bddm1pe+h2o2 1.81E+13 0.0 0.0
6282. bddmpe2+ho2=bddm2pe+h2o2 1.81E+13 0.0 0.0
6283. bddmpe2+oh=bddm1pe+h2o 1.21E+13 0.0 0.0
6284. bddmpe2+oh=bddm2pe+h2o 1.80E+13 0.0 0.0
6285. bddmpe2+o=bddm1pe+oh 1.21E+14 0.0 0.0
6286. bddmpe2+o=bddm2pe+oh 1.81E+14 0.0 0.0
6287. bddmpe2+h=bddm1pe+h2 3.61E+12 0.0 0.0
6288. bddmpe2+h=bddm2pe+h2 5.42E+12 0.0 0.0
6289. bddmpe2+ch3=bddm1pe+ch4 8.40E+12 0.0 -596.0
6290. bddmpe2+ch3=bddm2pe+ch4 1.26E+13 0.0 -596.0
6291. bddmpe2+ic4h7=bddm1pe+ic4h8 8.40E+12 0.0 -596.0
6292. bddmpe2+ic4h7=bddm2pe+ic4h8 1.26E+13 0.0 -596.0
6293. bddmpe2+c2h3=bddm1pe+c2h4 1.46E+14 -0.8 0.0
6294. bddmpe2+c2h3=bddm2pe+c2h4 2.20E+14 -0.8 0.0
6295. bbdtmpe1=ic4h8+ic4h9 5.00E+12 0.0 28000.0
6296. bbdtmpe1=bddm1pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
6297. bbdtmpe3=dddm2pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
6298. bbdtmpe3=bddm2pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
6299. bddtmpe2=tc4h9+ic4h8 2.00E+13 0.0 26700.0
6300. bddtmpe1=dddm1pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
6301. bddtmpe1=nec5h11+c3h6 1.30E+13 0.0 29500.0
6302. bbdtmpe1=bddtmpe2 1.00E+11 0.0 16100.0
6303. bbdtmpe1=bddtmpe1 6.00E+11 0.0 14100.0
6304. bbdtmpe3+o2=i2c8h16+ho2 4.50E+11 0.0 5000.0
6305. bddtmpe2+o2=i2c8h16+ho2 1.58E+12 0.0 5000.0
6306. bddtmpe2+o2=i1c8h16+ho2 1.38E+12 0.0 5000.0
6307. bddtmpe1+o2=i1c8h16+ho2 4.50E+11 0.0 5000.0
6308. bbdtmpe3+ho2=i2c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
6309. bddtmpe2+ho2=i2c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
6310. bddtmpe2+ho2=i1c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
6311. bddtmpe1+ho2=i1c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
6312. bbdtmpe3+oh=i2c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
6313. bddtmpe2+oh=i2c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
6314. bddtmpe2+oh=i1c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
6315. bddtmpe1+oh=i1c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
6316. bbdtmpe3+o=i2c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
6317. bddtmpe2+o=i2c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
6318. bddtmpe2+o=i1c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
6319. bddtmpe1+o=i1c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
6320. bbdtmpe3+h=i2c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
6321. bddtmpe2+h=i2c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
6322. bddtmpe2+h=i1c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
6323. bddtmpe1+h=i1c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
6324. bbdtmpe3=i2c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
6325. bddtmpe2=i2c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
6326. bddtmpe2=i1c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
6327. bddtmpe1=i1c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
6328. i1c8h16+h=ic8h15+h2 3.70E+13 0.0 3900.0
6329. i1c8h16+o=ic8h15+oh 3.70E+13 0.0 3900.0
6330. i1c8h16+oh=ic8h15+h2o 3.70E+13 0.0 3900.0
6331. i1c8h16+ch3=ic8h15+ch4 2.00E+12 0.0 7300.0
6332. i1c8h16+ic4h7=ic8h15+ic4h8 2.00E+12 0.0 7300.0
6333. i1c8h16+oh=aceton+nec5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
6334. i2c8h16+h=ic8h15+h2 3.70E+13 0.0 3900.0
6335. i2c8h16+o=ic8h15+oh 3.70E+13 0.0 3900.0
6336. i2c8h16+oh=ic8h15+h2o 3.70E+13 0.0 3900.0
6337. i2c8h16+ch3=ic8h15+ch4 2.00E+12 0.0 7300.0
6338. i2c8h16+ic4h7=ic8h15+ic4h8 2.00E+12 0.0 7300.0
6339. i2c8h16+oh=ch2o+pc7h15 1.00E+11 0.0 -4000.0
6340. i2c8h16+o=>ch2o+nec5h11+c2h3 1.00E+11 0.0 -1050.0
6341. ic8h15=ic4h8+ic4h7 4.51E+24 -3.0 54010.0
6342. ic8h15+o2=>ic4h7+ic4h7+ho2 2.00E+12 0.0 15000.0
6343. ic8h15+o2=>aceton+ic4h7+ch2o 1.00E+13 0.0 -250.0
6344. pc7h15=tc4h9+c3h6 3.52E+21 -2.2 28120.0
6345. pc7h15=>ic4h8+c3h6+h 3.32E+15 -0.5 38750.0
Declared duplicate reaction...
6346. pc7h15=>ic4h8+c3h6+h 2.78E+15 -0.7 38200.0
Declared duplicate reaction...
6347. i1c8h16=nec5h11+tc3h5 2.50E+16 0.0 71000.0
6348. i1c8h16=ch3+dddm1pe2 2.50E+16 0.0 71000.0
6349. i2c8h16=ic4h7+tc4h9 2.50E+16 0.0 71000.0
6350. i2c8h16=ch3+dddm2pe2 2.50E+16 0.0 71000.0
6351. bddm1pe=ic4h7+ic3h7 1.00E+16 0.0 71000.0
6352. bddm1pe=ic4h9+tc3h5 1.00E+16 0.0 97900.0
6353. bddm1pe=bddm1pe3+h 1.26E+15 0.0 81630.0
6354. bddm1pe=dm2my1pe+h 5.00E+16 0.0 88000.0
6355. bddm1pe+o2=bddm1pe3+ho2 2.00E+13 0.0 33140.0
6356. bddm1pe+o2=dm2my1pe+ho2 1.25E+13 0.0 37530.0
6357. bddm1pe+ho2=bddm1pe3+h2o2 2.44E+12 0.0 17000.0
6358. bddm1pe+ho2=dm2my1pe+h2o2 4.00E+12 0.0 19400.0
6359. bddm1pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
6360. oc7h14=>tc3h5+ic3h7+ch2o 6.00E+13 0.0 57200.0
6361. bddm1pe+oh=bddm1pe3+h2o 4.70E+07 1.6 -35.0
6362. bddm1pe+oh=dm2my1pe+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
6363. bddm1pe+oh=>ic3h7+tc3h5+ch2oh 7.00E+11 0.0 -928.0
6364. bddm1pe+o=bddm1pe3+oh 4.70E+05 2.5 2230.0
6365. bddm1pe+o=dm2my1pe+oh 2.20E+06 2.4 5500.0
6366. bddm1pe+o=>ac3h5+ic3h7+ch2o 1.00E+08 1.4 530.0
6367. bddm1pe+o=>c3h6+ic3h7+hco 1.00E+08 1.4 530.0
6368. bddm1pe+h=bddm1pe3+h2 9.10E+06 2.0 5000.0
6369. bddm1pe+h=dm2my1pe+h2 2.80E+07 2.0 7700.0
6370. bddm1pe+ch3=bddm1pe3+ch4 4.00E+11 0.0 9500.0
6371. bddm1pe+ch3=dm2my1pe+ch4 6.60E+11 0.0 11600.0
6372. bddm1pe+c2h3=bddm1pe3+c2h4 4.00E+11 0.0 16800.0
6373. bddm1pe+c2h3=dm2my1pe+c2h4 5.00E+11 0.0 18000.0
6374. bddm1pe+c2h5=bddm1pe3+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
6375. bddm1pe+c2h5=dm2my1pe+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
6376. bddm1pe+Cc4h7-1=bddm1pe3+c4h8 4.00E+11 0.0 16800.0
6377. bddm1pe+Cc4h7-1=dm2my1pe+c4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
6378. bddm1pe+M=bddm1pe1+h+M 1.50E+17 0.0 96560.0
6379. bddm1pe+o2=bddm1pe1+ho2 2.00E+13 0.0 61500.0
6380. bddm1pe+oh=bddm1pe1+h2o 1.00E+13 0.0 5936.0
6381. bddm1pe+o=bddm1pe1+oh 1.20E+11 0.7 7633.0
6382. bddm1pe+h=bddm1pe1+h2 5.00E+13 0.0 15000.0
6383. bddm1pe+ch3=bddm1pe1+ch4 4.50E+12 0.0 11128.0
6384. bddm1pe+c2h3=bddm1pe1+c2h4 4.50E+12 0.0 16000.0
6385. bddm1pe+ac3h5=bddm1pe1+c3h6 4.50E+12 0.0 16000.0
6386. bddm1pe1+o2=>ch3co+ic4h9+hco 4.00E+12 0.0 -250.0
6387. bddm2pe=bme2pe4+ch3 1.00E+16 0.0 71000.0
6388. bddm2pe=bddm2pe1+h 1.00E+16 0.0 82600.0
6389. bddm2pe=bddm3pe2+h 1.00E+16 0.0 77400.0
6390. bddm2pe+o2=bddm2pe1+ho2 1.25E+13 0.0 28560.0
6391. bddm2pe+o2=bddm3pe2+ho2 2.00E+13 0.0 27800.0
6392. bddm2pe+ho2=bddm2pe1+h2o2 8.00E+11 0.0 19400.0
6393. bddm2pe+ho2=bddm3pe2+h2o2 2.16E+12 0.0 14400.0
6394. bddm2pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
6395. oc7h14=>aceton+ic4h8 6.00E+13 0.0 57200.0
6396. bddm2pe+oh=bddm2pe1+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
6397. bddm2pe+oh=bddm3pe2+h2o 5.73E+10 0.5 63.0
6398. bddm2pe+oh=>aceton+c3h6+ch3 7.00E+11 0.0 -928.0
6399. bddm2pe+o=bddm2pe1+oh 2.20E+06 2.4 5500.0
6400. bddm2pe+o=bddm3pe2+oh 1.10E+13 0.0 3280.0
6401. bddm2pe+o=>aceton+ic4h8 1.00E+08 1.4 530.0
6402. bddm2pe+o=>c3h6+ic3h7+hco 1.00E+08 1.4 530.0
6403. bddm2pe+h=bddm2pe1+h2 2.80E+07 2.0 7700.0
6404. bddm2pe+h=bddm3pe2+h2 1.26E+14 0.0 7303.0
6405. bddm2pe+ch3=bddm2pe1+ch4 6.50E+11 0.0 11600.0
6406. bddm2pe+ch3=bddm3pe2+ch4 1.00E+11 0.0 7900.0
6407. bddm2pe+c2h3=bddm2pe1+c2h4 5.00E+11 0.0 18000.0
6408. bddm2pe+c2h3=bddm3pe2+c2h4 2.00E+11 0.0 14300.0
6409. bddm2pe+c2h5=bddm2pe1+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
6410. bddm2pe+c2h5=bddm3pe2+c2h6 1.00E+11 0.0 7900.0
6411. bddm2pe+Cc4h7-1=bddm2pe1+c4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
6412. bddm2pe+Cc4h7-1=bddm3pe2+c4h8 2.00E+11 0.0 14300.0
6413. bddm2pe=bddm2pe3+h 7.50E+16 0.0 96560.0
6414. bddm2pe+o2=bddm2pe3+ho2 1.00E+13 0.0 55100.0
6415. bddm2pe+oh=bddm2pe3+h2o 5.00E+12 0.0 5936.0
6416. bddm2pe+o=bddm2pe3+oh 6.00E+10 0.7 7633.0
6417. bddm2pe+h=bddm2pe3+h2 2.50E+13 0.0 15000.0
6418. bddm2pe+ch3=bddm2pe3+ch4 2.30E+12 0.0 11128.0
6419. bddm2pe+c2h3=bddm2pe3+c2h4 2.30E+12 0.0 16000.0
6420. bddm2pe+ac3h5=bddm2pe3+c3h6 2.30E+12 0.0 16000.0
6421. bddm2pe3+o2=>bmepryl+aceton 4.00E+12 0.0 -250.0
6422. dddm1pe=ac3h5+tc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
6423. dddm1pe=nec5h11+c2h3 1.00E+16 0.0 71000.0
6424. dddm1pe=dddm1pe3+h 1.26E+15 0.0 82400.0
6425. dddm1pe+o2=dddm1pe3+ho2 2.00E+13 0.0 33140.0
6426. dddm1pe+ho2=dddm1pe3+h2o2 2.44E+12 0.0 17000.0
6427. dddm1pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
6428. dddm1pe+oh=dddm1pe3+h2o 4.70E+07 1.6 -35.0
6429. bddm2pe+oh=>ch2o+c2h4+tc4h9 7.00E+11 0.0 -928.0
6430. dddm1pe+o=dddm1pe3+oh 4.70E+05 2.5 2230.0
6431. dddm1pe+o=c2h3+tc4h9+ch2o 1.00E+08 1.4 530.0
6432. dddm1pe+o=c2h4+tc4h9+hco 1.00E+08 1.4 530.0
6433. dddm1pe+h=dddm1pe3+h2 9.10E+06 2.0 5000.0
6434. dddm1pe+ch3=dddm1pe3+ch4 4.00E+11 0.0 9500.0
6435. dddm1pe+c2h3=dddm1pe3+c2h4 4.00E+11 0.0 16800.0
6436. dddm1pe+c2h5=dddm1pe3+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
6437. dddm1pe+ac3h5=dddm1pe3+c3h6 4.00E+11 0.0 16800.0
6438. dddm1pe+ic4h7=dddm1pe3+ic4h8 4.00E+11 0.0 16800.0
6439. dddm1pe+Cc4h7-1=dddm1pe3+c4h8 4.00E+11 0.0 16800.0
6440. dddm1pe+M=dddm1pe2+h+M 2.00E+17 0.0 96560.0
6441. dddm1pe+o2=dddm1pe2+ho2 2.70E+13 0.0 60800.0
6442. dddm1pe+oh=dddm1pe2+h2o 1.40E+13 0.0 5936.0
6443. dddm1pe+o=dddm1pe2+oh 1.60E+11 0.7 7633.0
6444. dddm1pe+h=dddm1pe2+h2 7.00E+13 0.0 15000.0
6445. dddm1pe+ch3=dddm1pe2+ch4 6.00E+12 0.0 11128.0
6446. dddm1pe+c2h3=dddm1pe2+c2h4 6.00E+12 0.0 16000.0
6447. dddm1pe+ac3h5=dddm1pe2+c3h6 6.00E+12 0.0 16000.0
6448. dddm1pe2+o2=>nec5h11+hco+hco 4.00E+12 0.0 -250.0
6449. dddm2pe=tc4h9+sc3h5 1.00E+16 0.0 71000.0
6450. dddm2pe=dddm2pe1+h 5.00E+16 0.0 80000.0
6451. dddm2pe+o2=dddm2pe1+ho2 1.25E+13 0.0 34660.0
6452. dddm2pe+ho2=dddm2pe1+h2o2 4.80E+12 0.0 38500.0
6453. dddm2pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
6454. oc7h14=>tc4h9+c2h4+hco 6.00E+13 0.0 57200.0
6455. oc7h14=>tc4h9+c2h3+ch2o 6.00E+13 0.0 57200.0
6456. oc7h14=>nec5h11+ch2hco 6.00E+13 0.0 57200.0
6457. dddm2pe+oh=dddm2pe1+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
6458. dddm2pe+oh=>nec5h11+ch3hco 7.00E+11 0.0 -928.0
6459. dddm2pe+o=dddm2pe1+oh 2.20E+06 2.4 5500.0
6460. dddm2pe+o=c2h4+tc4h9+hco 1.00E+08 1.4 530.0
6461. dddm2pe+o=ch3hco+ic4h7+ch3 1.00E+08 1.4 530.0
6462. dddm2pe+o=nec5h11+ch2hco 1.00E+08 1.4 530.0
6463. dddm2pe+h=dddm2pe1+h2 2.80E+07 2.0 7700.0
6464. dddm2pe+ch3=dddm2pe1+ch4 6.50E+11 0.0 11600.0
6465. dddm2pe+c2h3=dddm2pe1+c2h4 5.00E+11 0.0 18000.0
6466. dddm2pe+c2h5=dddm2pe1+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
6467. dddm2pe+ac3h5=dddm2pe1+c3h6 5.00E+11 0.0 18000.0
6468. dddm2pe+ic4h7=dddm2pe1+ic4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
6469. dddm2pe+Cc4h7-1=dddm2pe1+c4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
6470. dddm2pe+M=dddm2pe2+h+M 1.50E+17 0.0 96560.0
6471. dddm2pe+o2=dddm2pe2+ho2 2.00E+13 0.0 55500.0
6472. dddm2pe+oh=dddm2pe2+h2o 1.00E+13 0.0 5936.0
6473. dddm2pe+o=dddm2pe2+oh 1.20E+11 0.7 7633.0
6474. dddm2pe+h=dddm2pe2+h2 5.00E+13 0.0 15000.0
6475. dddm2pe+ch3=dddm2pe2+ch4 4.50E+12 0.0 11128.0
6476. dddm2pe+c2h3=dddm2pe2+c2h4 4.50E+12 0.0 16000.0
6477. dddm2pe+ac3h5=dddm2pe2+c3h6 4.50E+12 0.0 16000.0
6478. dddm2pe2+o2=>ch3co+tc4h9+hco 4.00E+12 0.0 -250.0
6479. dddm2pe2+o2=>ch3hco+tc4h9+co 4.00E+12 0.0 -250.0
6480. dddm2pe1+ho2=>acrol+tc4h9+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6481. dddm1pe2=tc4h9+ac3h4 2.50E+13 0.0 45300.0
6482. bddm1pe3=>tc3h5+sc3h5+ch3 2.50E+13 0.0 45300.0

6483. bddm1pe3+ho2=>ic3h5cho+ic3h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6484. bme2pe4=>ic4h7+c2h3+h 2.50E+13 0.0 45300.0
6485. bme2pe4+ho2=>ic4h7+ch3hco+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6486. dddm1pe3=ic4h7+c2h3+ch3 2.50E+13 0.0 45300.0
6487. dddm1pe3+ho2=>acrol+tc4h9+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6488. dm2my1pe=ic4h9+ac3h4 2.50E+13 0.0 45300.0
6489. dm2my1pe+ho2=>ic3h5cho+ic3h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6490. bddm3pe2=ic3h7+c3h3+ch3 2.50E+13 0.0 45300.0
6491. bddm2pe1+ho2=>ic3h5cho+ic3h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6492. bddm3pe2+ho2=>aceton+ic4h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6493. bddm2pe3+ho2=>aceton+ic4h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6494. dddm1pe2+ho2=>nec5h11+ch2co+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6495. dddm2pe2+ho2=>acrol+tc4h9+oh 7.50E+11 0.0 0.0
6496. dddm1pe+h=nec5h11+c2h4 7.23E+12 0.0 1302.0
6497. bddm1pe+h=ic4h9+c3h6 7.23E+12 0.0 1302.0
6498. bddm2pe+h=ic3h7+ic4h8 7.23E+12 0.0 1302.0
6499. dddm2pe+h=tc4h9+c3h6 7.23E+12 0.0 1302.0
6500. hxol=h+hxol1j 6.00E+15 0.0 95000.0
6501. hxol=h+hxol2j 6.00E+15 0.0 98706.0
6502. hxol=h+hxol3j 6.00E+15 0.0 98706.0
6503. hxol=h+hxol4j 6.00E+15 0.0 98706.0
6504. hxol=h+hxol5j 6.00E+15 0.0 98706.0
6505. hxol=h+hxol6j 9.00E+15 0.0 100906.0
6506. hxol=h+c6h13ojA 5.60E+13 0.0 103980.5
6507. hxol=Ac6h13+oh 4.20E+15 0.0 94164.8
6508. hxol=Ac5h11+ch2oh 2.30E+16 0.0 86239.6
6509. hxol=nc3h7+ch2ch2ch2oh 3.80E+16 0.0 85856.1
6510. hxol=pc4h9+pc2h4oh 1.00E+17 0.0 87176.5
6511. hxol=c2h5+b1ol4j 2.60E+16 0.0 86538.8
6512. hxol=ch3+pe1ol5j 4.90E+16 0.0 88409.1
6513. hxol+o2=ho2+hxol1j 1.40E+10 0.0 45935.0
6514. hxol+o2=ho2+hxol2j 1.40E+10 0.0 49097.5
6515. hxol+o2=ho2+hxol3j 1.40E+10 0.0 49097.5
6516. hxol+o2=ho2+hxol4j 1.40E+10 0.0 49097.5
6517. hxol+o2=ho2+hxol5j 1.40E+10 0.0 49097.5
6518. hxol+o2=ho2+hxol6j 2.10E+10 0.0 51296.5
6519. hxol+o=oh+c6h13ojA 1.46E-03 4.7 1726.9
6520. hxol+o=oh+hxol1j 1.45E+05 2.5 876.4
6521. hxol+o=oh+hxol6j 5.10E+13 0.0 7850.0
6522. hxol+o=oh+hxol5j 2.60E+13 0.0 5200.0
6523. hxol+o=oh+hxol4j 2.60E+13 0.0 5200.0
6524. hxol+o=oh+hxol3j 2.60E+13 0.0 5200.0
6525. hxol+o=oh+hxol2j 2.60E+13 0.0 5200.0
6526. hxol+h=h2+c6h13ojA 5.53E-23 10.6 -4459.0
6527. hxol+h=h2+hxol1j 1.79E+05 2.5 3420.0
6528. hxol+h=h2+hxol6j 2.90E+07 2.0 7700.0
6529. hxol+h=h2+hxol2j 9.00E+06 2.0 5000.0
6530. hxol+h=h2+hxol5j 1.30E+06 2.4 4471.0
6531. hxol+h=h2+hxol4j 1.30E+06 2.4 4471.0
6532. hxol+h=h2+hxol3j 1.30E+06 2.4 4471.0
6533. hxol+oh=h2o+c6h13ojA 2.81E+02 3.0 -580.3
6534. hxol+oh=h2o+hxol1j 1.31E+05 2.4 -1456.6
6535. hxol+oh=h2o+hxol6j 5.25E+09 1.0 1590.0
6536. hxol+oh=h2o+hxol5j 4.68E+07 1.6 -35.0
6537. hxol+oh=h2o+hxol4j 4.68E+07 1.6 -35.0
6538. hxol+oh=h2o+hxol3j 4.68E+07 1.6 -35.0
6539. hxol+oh=h2o+hxol2j 4.68E+07 1.6 -35.0

6540. hxol+ho2=h2o2+hxol1j 8.20E+03 2.5 10750.0
6541. hxol+ho2=h2o2+c6h13ojA 2.50E+12 0.0 24000.0
6542. hxol+ho2=h2o2+hxol6j 6.00E+11 0.0 17000.0
6543. hxol+ho2=h2o2+hxol5j 4.00E+11 0.0 15500.0
6544. hxol+ho2=h2o2+hxol4j 4.00E+11 0.0 15500.0
6545. hxol+ho2=h2o2+hxol3j 4.00E+11 0.0 15500.0
6546. hxol+ho2=h2o2+hxol2j 4.00E+11 0.0 15500.0
6547. hxol+ch3=ch4+c6h13ojA 2.04E+00 3.6 7722.3
6548. hxol+ch3=ch4+hxol1j 1.99E+01 3.4 7634.8
6549. hxol+ch3=ch4+hxol6j 3.00E-01 4.0 8200.0
6550. hxol+ch3=ch4+hxol5j 2.00E+11 0.0 9600.0
6551. hxol+ch3=ch4+hxol4j 2.00E+11 0.0 9600.0
6552. hxol+ch3=ch4+hxol3j 2.00E+11 0.0 9600.0
6553. hxol+ch3=ch4+hxol2j 2.00E+11 0.0 9600.0
6554. hxol+hco=ch2o+hxol1j 1.00E+07 1.9 17000.0
6555. hxol+hco=ch2o+c6h13ojA 3.40E+04 2.5 13500.0
6556. hxol+hco=ch2o+hxol6j 1.00E+05 2.5 18500.0
6557. hxol+hco=ch2o+hxol5j 1.00E+07 1.9 17000.0
6558. hxol+hco=ch2o+hxol4j 1.00E+07 1.9 17000.0
6559. hxol+hco=ch2o+hxol3j 1.00E+07 1.9 17000.0
6560. hxol+hco=ch2o+hxol2j 1.00E+07 1.9 17000.0
6561. hxol+ch2oh=ch3oh+hxol1j 6.00E+01 3.0 12000.0
6562. hxol+ch2oh=ch3oh+c6h13ojA 1.20E+02 2.8 10800.0
6563. hxol+ch2oh=ch3oh+hxol6j 9.90E+01 3.0 14000.0
6564. hxol+ch2oh=ch3oh+hxol5j 6.00E+01 3.0 12000.0
6565. hxol+ch2oh=ch3oh+hxol4j 6.00E+01 3.0 12000.0
6566. hxol+ch2oh=ch3oh+hxol3j 6.00E+01 3.0 12000.0
6567. hxol+ch2oh=ch3oh+hxol2j 6.00E+01 3.0 12000.0
6568. hxol+ch3o=ch3oh+hxol1j 1.50E+11 0.0 4500.0
6569. hxol+ch3o=ch3oh+c6h13ojA 2.30E+10 0.0 2900.0
6570. hxol+ch3o=ch3oh+hxol6j 1.60E+11 0.0 7300.0
6571. hxol+ch3o=ch3oh+hxol5j 1.50E+11 0.0 4500.0
6572. hxol+ch3o=ch3oh+hxol4j 1.50E+11 0.0 4500.0
6573. hxol+ch3o=ch3oh+hxol3j 1.50E+11 0.0 4500.0
6574. hxol+ch3o=ch3oh+hxol2j 1.50E+11 0.0 4500.0
6575. hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol1j 3.00E+12 0.0 17500.0
6576. hxol+ch3o2=ch3o2h+c6h13ojA 1.50E+12 0.0 15000.0
6577. hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol6j 6.00E+12 0.0 20000.0
6578. hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol5j 3.00E+12 0.0 17500.0
6579. hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol4j 3.00E+12 0.0 17500.0
6580. hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol3j 3.00E+12 0.0 17500.0
6581. hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol2j 3.00E+12 0.0 17500.0
6582. hxol+c2h5=c2h6+hxol1j 2.00E+11 0.0 11000.0
6583. hxol+c2h5=c2h6+c6h13ojA 1.00E+11 0.0 9200.0
6584. hxol+c2h5=c2h6+hxol6j 3.00E+11 0.0 13500.0
6585. hxol+c2h5=c2h6+hxol5j 2.00E+11 0.0 11000.0
6586. hxol+c2h5=c2h6+hxol4j 2.00E+11 0.0 11000.0
6587. hxol+c2h5=c2h6+hxol3j 2.00E+11 0.0 11000.0
6588. hxol+c2h5=c2h6+hxol2j 2.00E+11 0.0 11000.0
6589. hxol1j=hxol4j 3.60E+08 1.1 20372.7
Reverse Arrhenius coefficients: 9.02E+08 0.9 17627.9
6590. hxol1j=hxol5j 9.65E+07 1.0 15138.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.02E+08 1.0 12262.0
6591. hxol1j=hxol6j 1.97E+07 1.0 21275.8
Reverse Arrhenius coefficients: 3.17E+07 1.0 16924.4
6592. hxol6j=hxol3j 4.57E+08 1.0 18196.5
Reverse Arrhenius coefficients: 1.08E+09 1.0 19803.7

6593. hxol6j=hxol2j 7.93E+07 1.0 12896.5
Reverse Arrhenius coefficients: 1.85E+08 1.0 14503.7
6594. hxol5j=hxol2j 3.70E+08 1.1 18934.1
Reverse Arrhenius coefficients: 8.79E+08 0.9 19065.9
6595. hxol1j=ch3hco+pc4h9 2.00E+13 0.0 28700.0
6596. hxol6j=b1ol4j+c2h4 2.00E+13 0.0 28700.0
6597. hxol5j=ch2ch2ch2oh+c3h6 2.00E+13 0.0 28700.0
6598. hxol4j=ch3+pe1ol4e 2.00E+13 0.0 31000.0
6599. hxol3j=c2h5+b1ol3e 2.00E+13 0.0 28700.0
6600. hxol3j=ch2oh+c5h10 2.00E+13 0.0 28700.0
6601. hxol2j=nc3h7+c2h3ch2oh 2.00E+13 0.0 28700.0
6602. oh+c6h12-1=hxol2j 9.93E+11 0.0 -960.0
6603. c6h13ojA+m=c5h11hco+h+m 1.16E+35 -5.9 25274.0
6604. hxol1j+m=c5h11hco+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
6605. hxol2j=hxol2e+h 1.20E+13 0.0 35602.0
6606. hxol2j=c5h11hco+h 1.20E+13 0.0 37412.1
6607. hxol3j=hxol3e+h 1.20E+13 0.0 34252.1
6608. hxol3j=hxol2e+h 1.20E+13 0.0 37412.1
6609. hxol4j=hxol4e+h 1.20E+13 0.0 34322.1
6610. hxol4j=hxol3e+h 1.20E+13 0.0 34252.1
6611. hxol5j=hxol4e+h 1.20E+13 0.0 34322.1
6612. hxol5j=hxol5e+h 1.80E+13 0.0 37082.1
6613. hxol6j=hxol5e+h 1.20E+13 0.0 34882.3
6614. hxol1j+o2=c5h11hco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6615. c6h13ojA+o2=c5h11hco+ho2 4.00E+10 0.0 1100.0
6616. hxol6j+o2=hxol5e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6617. hxol5j+o2=hxol4e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6618. hxol5j+o2=hxol5e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6619. hxol4j+o2=hxol4e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6620. hxol4j+o2=hxol3e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6621. hxol3j+o2=hxol3e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6622. hxol3j+o2=hxol2e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6623. hxol2j+o2=hxol2e+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6624. hxol2j+o2=c5h11hco+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
6625. c6h13ojA+co=co2+Ac6h13 4.68E+02 3.2 5380.0
6626. c6h13ojA+h=ch2oh+Ac5h11 3.00E+13 0.0 0.0
6627. c6h13ojA+oh=c5h11hco+h2o 1.00E+13 0.0 0.0
6628. hxol1j+ho2=c5h11hco+h2o2 4.00E+13 0.0 0.0
6629. hxol1j+oh=c5h11hco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6630. hxol1j+o=c5h11hco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6631. hxol5e+oh=hxol4e6j+h2o 3.10E+06 2.0 -300.0
6632. hxol5e+o=hxol4e6j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6633. hxol5e+h=hxol4e6j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6634. hxol5e+ch3=hxol4e6j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6635. hxol5e+ho2=hxol4e6j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6636. hxol5e+oh=ch2o+pe1ol5j 1.00E+11 0.0 -4000.0
6637. hxol5e+o=hco+pe1ol5j 1.00E+11 0.0 -1050.0
6638. hxol5e=ac3h5+ch2ch2ch2oh 8.00E+15 0.0 66425.0
6639. hxol5e=Dc4h7-1+pc2h4oh 1.00E+17 0.0 86270.0
6640. hxol5e=Ec5h9-1+ch2oh 1.00E+17 0.0 84640.0
6641. hxol5e+oh=hxol5e1j+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
6642. hxol5e+o=hxol5e1j+oh 1.45E+05 2.5 876.4
6643. hxol5e+h=hxol5e1j+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
6644. hxol5e+ch3=hxol5e1j+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
6645. hxol5e+ho2=hxol5e1j+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
6646. hxol4e+oh=hxol4e6j+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6647. hxol4e+o=hxol4e6j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0

6648. hxol4e+h=hxol4e6j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6649. hxol4e+ch3=hxol4e6j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6650. hxol4e+ho2=hxol4e6j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6651. hxol4e+oh=hxol3e5j+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6652. hxol4e+o=hxol3e5j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6653. hxol4e+h=hxol3e5j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6654. hxol4e+ch3=hxol3e5j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6655. hxol4e+ho2=hxol3e5j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6656. hxol4e+oh=ch3hco+b1ol4j 1.00E+11 0.0 -4000.0
6657. hxol4e+o=ch2hco+b1ol4j 1.00E+11 0.0 -1050.0
6658. hxol4e+oh=c2h5+b1*o4ol 1.00E+11 0.0 -4000.0
6659. hxol4e+o=c2h5+b1j*o4ol 1.00E+11 0.0 -1050.0
6660. hxol4e=Cc4h7-1+pc2h4oh 8.00E+15 0.0 70550.0
6661. hxol4e=Ec5h9-2+ch2oh 1.00E+17 0.0 84570.0
6662. hxol4e+oh=hxol4e1j+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
6663. hxol4e+o=hxol4e1j+oh 1.45E+05 2.5 876.4
6664. hxol4e+h=hxol4e1j+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
6665. hxol4e+ch3=hxol4e1j+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
6666. hxol4e+ho2=hxol4e1j+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
6667. hxol3e+oh=hxol2e4j+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6668. hxol3e+o=hxol2e4j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6669. hxol3e+h=hxol2e4j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6670. hxol3e+ch3=hxol2e4j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6671. hxol3e+ho2=hxol2e4j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6672. hxol3e+oh=hxol3e5j+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6673. hxol3e+o=hxol3e5j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6674. hxol3e+h=hxol3e5j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6675. hxol3e+ch3=hxol3e5j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6676. hxol3e+ho2=hxol3e5j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6677. hxol3e+oh=ethco+ch2ch2ch2oh 1.00E+11 0.0 -4000.0
6678. hxol3e+o=c2h5co+ch2ch2ch2oh 1.00E+11 0.0 -1050.0
6679. hxol3e+oh=nc3h7+hoc2h4hco 1.00E+11 0.0 -4000.0
6680. hxol3e+o=nc3h7+hoc2h4co 1.00E+11 0.0 -1050.0
6681. hxol3e=Cc5h9-1+ch2oh 8.00E+15 0.0 71400.0
6682. hxol3e+oh=hxol3e1j+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
6683. hxol3e+o=hxol3e1j+oh 1.45E+05 2.5 876.4
6684. hxol3e+h=hxol3e1j+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
6685. hxol3e+ch3=hxol3e1j+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
6686. hxol3e+ho2=hxol3e1j+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
6687. hxol2e+oh=hxol2e4j+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6688. hxol2e+o=hxol2e4j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6689. hxol2e+h=hxol2e4j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6690. hxol2e+ch3=hxol2e4j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6691. hxol2e+ho2=hxol2e4j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6692. hxol2e+oh=hxol2e1j+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
6693. hxol2e+o=hxol2e1j+oh 1.45E+05 2.5 876.4
6694. hxol2e+h=hxol2e1j+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
6695. hxol2e+ch3=hxol2e1j+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
6696. hxol2e+ho2=hxol2e1j+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
6697. hxol2e+oh=nc3h7hco+pc2h4oh 1.00E+11 0.0 -4000.0
6698. hxol2e+o=c3h7co+pc2h4oh 1.00E+11 0.0 -1050.0
6699. hxol2e+oh=pc4h9+hoch2hco 1.00E+11 0.0 -4000.0
6700. hxol2e+o=pc4h9+hoch2co 1.00E+11 0.0 -1050.0
6701. hxol2e=c2h5+b1ol2e4j 8.00E+15 0.0 67850.0
6702. hxol2e=Cc6h11-1+oh 8.00E+15 0.0 78850.0
6703. hxol5e1j=ch3hco+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 28750.0
6704. hxol5e1j+m=c5h9hco-1+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0

6705. hxol5e1j+o2=c5h9hco-1+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6706. hxol5e1j+o=c5h9hco-1+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6707. hxol5e1j+ho2=c5h9hco-1+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
6708. hxol5e1j+oh=c5h9hco-1+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6709. hxol4e1j=ch3hco+Cc4h7-1 2.00E+13 0.0 13030.0
6710. hxol4e1j+m=c5h9hco-2+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
6711. hxol4e1j+o2=c5h9hco-2+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6712. hxol4e1j+o=c5h9hco-2+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6713. hxol4e1j+ho2=c5h9hco-2+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
6714. hxol4e1j+oh=c5h9hco-2+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6715. hxol3e1j=ch3hco+Ac4h7-1 2.00E+13 0.0 41590.0
6716. hxol3e1j+m=c5h9hco-3+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
6717. hxol3e1j+o2=c5h9hco-3+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6718. hxol3e1j+o=c5h9hco-3+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6719. hxol3e1j+ho2=c5h9hco-3+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
6720. hxol3e1j+oh=c5h9hco-3+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6721. hxol4e6j=c4h6+pc2h4oh 2.00E+13 0.0 36400.0
6722. hxol3e5j=c5h8-13+ch2oh 2.00E+13 0.0 29160.0
6723. c6h10-13+oh=hxol2e4j 9.93E+11 0.0 -960.0
6724. hxol2e4j=ch3+pe1ol2e4e 2.00E+13 0.0 39090.0
6725. c5h9hco-3+oh=h2o+c5h9co-3 2.69E+10 0.8 -340.0
6726. c5h9hco-3+h=h2+c5h9co-3 4.00E+13 0.0 4200.0
6727. c5h9hco-3+o=oh+c5h9co-3 5.00E+12 0.0 1790.0
6728. c5h9hco-3+ch3=ch4+c5h9co-3 1.70E+12 0.0 8440.0
6729. c5h9hco-3+ho2=h2o2+c5h9co-3 2.80E+12 0.0 13600.0
6730. c5h9hco-2+oh=h2o+c5h9co-2 2.69E+10 0.8 -340.0
6731. c5h9hco-2+h=h2+c5h9co-2 4.00E+13 0.0 4200.0
6732. c5h9hco-2+o=oh+c5h9co-2 5.00E+12 0.0 1790.0
6733. c5h9hco-2+ch3=ch4+c5h9co-2 1.70E+12 0.0 8440.0
6734. c5h9hco-2+ho2=h2o2+c5h9co-2 2.80E+12 0.0 13600.0
6735. c5h9hco-1+oh=h2o+c5h9co-1 2.69E+10 0.8 -340.0
6736. c5h9hco-1+h=h2+c5h9co-1 4.00E+13 0.0 4200.0
6737. c5h9hco-1+o=oh+c5h9co-1 5.00E+12 0.0 1790.0
6738. c5h9hco-1+ch3=ch4+c5h9co-1 1.70E+12 0.0 8440.0
6739. c5h9hco-1+ho2=h2o2+c5h9co-1 2.80E+12 0.0 13600.0
6740. c5h9co-1=co+Ec5h9-1 8.64E+15 0.0 14400.0
6741. c5h9co-2=co+Ec5h9-2 8.64E+15 0.0 14400.0
6742. c5h9co-3=co+Cc5h9-1 8.64E+15 0.0 14400.0
6743. Ec5h9-2=c2h4+sc3h5 4.00E+13 0.0 35060.0
6744. Ec5h9-2+o2=c5h8-13+ho2 5.90E+05 0.0 0.0
6745. Ec5h9-2=c5h8-13+h 1.20E+13 0.0 31600.0
6746. pe1ol5j=pe1ol2j 5.70E+08 1.0 17300.0
6747. pe1ol5j=pe1ol1j 9.90E+07 1.0 10000.0
6748. pe1ol1j=pe1ol4j 5.70E+08 1.0 23300.0
6749. pe1ol5j=ch2ch2ch2oh+c2h4 2.00E+13 0.0 28700.0
6750. oh+c5h10=pe1ol2j 9.93E+11 0.0 -960.0
6751. pe1ol4j=c3h6+pc2h4oh 2.00E+13 0.0 28700.0
6752. pe1ol3j=ch2oh+c4h8 2.00E+13 0.0 28700.0
6753. pe1ol3j=ch3+b1ol3e 2.00E+13 0.0 28700.0
6754. pe1ol2j=c2h5+c2h3ch2oh 2.00E+13 0.0 28700.0
6755. pe1ol1j=ch3hco+nc3h7 2.00E+13 0.0 28700.0
6756. pe1ol4e+oh=pe1ol3e5j+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6757. pe1ol4e+o=pe1ol3e5j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6758. pe1ol4e+h=pe1ol3e5j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6759. pe1ol4e+ch3=pe1ol3e5j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6760. pe1ol4e+ho2=pe1ol3e5j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6761. pe1ol4e+oh=pe1jol4e+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6

6762. pe1ol4e+o=pe1jol4e+oh 1.45E+05 2.5 876.4
6763. pe1ol4e+h=pe1jol4e+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
6764. pe1ol4e+ch3=pe1jol4e+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
6765. pe1ol4e+ho2=pe1jol4e+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
6766. pe1ol4e+oh=ch2o+b1ol4j 1.00E+11 0.0 -4000.0
6767. pe1ol4e+o=hco+b1ol4j 1.00E+11 0.0 -1050.0
6768. pe1ol3e5j=c4h6+ch2oh 2.00E+13 0.0 34600.0
6769. pe1jol4e=ch3hco+ac3h5 2.00E+13 0.0 13950.0
6770. pe1jol4e+m=c4h7hco-1+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
6771. pe1jol4e+o2=c4h7hco-1+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6772. pe1jol4e+o=c4h7hco-1+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6773. pe1jol4e+ho2=c4h7hco-1+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
6774. pe1jol4e+oh=c4h7hco-1+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6775. pe1ol2e4e+oh=pe1jol2e4e+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6776. pe1ol2e4e+o=pe1jol2e4e+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6777. pe1ol2e4e+h=pe1jol2e4e+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6778. pe1ol2e4e+ch3=pe1jol2e4e+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6779. pe1ol2e4e+ho2=pe1jol2e4e+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6780. pe1jol2e4e=c4h6+hco 2.00E+13 0.0 23150.0
6781. pe1jol2e4e+m=c4h5hco+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
6782. pe1jol2e4e+o2=c4h5hco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6783. pe1jol2e4e+o=c4h5hco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6784. pe1jol2e4e+ho2=c4h5hco+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
6785. pe1jol2e4e+oh=c4h5hco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6786. c4h5hco+oh=h2o+c4h5co 2.69E+10 0.8 -340.0
6787. c4h5hco+h=h2+c4h5co 4.00E+13 0.0 4200.0
6788. c4h5hco+o=oh+c4h5co 5.00E+12 0.0 1790.0
6789. c4h5hco+ch3=ch4+c4h5co 1.70E+12 0.0 8440.0
6790. c4h5hco+ho2=h2o2+c4h5co 2.80E+12 0.0 13600.0
6791. c4h5hco+o2=ho2+c4h5co 2.00E+13 0.5 42200.0
6792. c4h5co+m=nc4h5+co+m 8.60E+15 0.0 23000.0
6793. b1ol=h+b1ol1j 6.00E+15 0.0 95000.0
6794. b1ol=h+b1ol2j 6.00E+15 0.0 98706.0
6795. b1ol=h+b1ol3j 6.00E+15 0.0 98706.0
6796. b1ol=h+b1ol4j 9.00E+15 0.0 100906.0
6797. b1ol=h+c4h9o 6.30E+13 0.0 103234.0
6798. b1ol=pc4h9+oh 4.90E+15 0.0 93374.0
6799. b1ol=nc3h7+ch2oh 2.40E+16 0.0 85771.0
6800. b1ol=ch3+ch2ch2ch2oh 7.10E+16 0.0 86221.0
6801. b1ol=c2h5+pc2h4oh 5.00E+16 0.0 85771.0
6802. b1ol+o2=ho2+b1ol1j 1.40E+10 0.0 45935.0
6803. b1ol+o2=ho2+b1ol2j 1.40E+10 0.0 49097.5
6804. b1ol+o2=ho2+b1ol3j 1.40E+10 0.0 49097.5
6805. b1ol+o2=ho2+b1ol4j 2.10E+10 0.0 51296.5
6806. b1ol+o=oh+c4h9o 1.00E+13 0.0 3280.0
6807. b1ol+o=oh+b1ol1j 2.60E+13 0.0 5200.0
6808. b1ol+o=oh+b1ol2j 2.60E+13 0.0 5200.0
6809. b1ol+o=oh+b1ol3j 2.60E+13 0.0 5200.0
6810. b1ol+o=oh+b1ol4j 5.10E+13 0.0 7850.0
6811. b1ol+h=h2+c4h9o 5.53E-23 10.6 -4459.0
6812. b1ol+h=h2+b1ol1j 1.79E+05 2.5 3420.0
6813. b1ol+h=h2+b1ol2j 9.00E+06 2.0 5000.0
6814. b1ol+h=h2+b1ol3j 9.00E+06 2.0 5000.0
6815. b1ol+h=h2+b1ol4j 2.90E+07 2.0 7700.0
6816. b1ol+oh=h2o+c4h9o 1.10E+06 2.0 -1865.0
6817. b1ol+oh=h2o+b1ol1j 2.60E+06 2.0 -765.0
6818. b1ol+oh=h2o+b1ol2j 2.60E+06 2.0 -765.0

6819. b1ol+oh=h2o+b1ol3j 2.60E+06 2.0 -765.0
6820. b1ol+oh=h2o+b1ol4j 2.70E+06 2.0 450.0
6821. b1ol+ho2=h2o2+c4h9o 2.50E+12 0.0 24000.0
6822. b1ol+ho2=h2o2+b1ol1j 4.00E+11 0.0 16000.0
6823. b1ol+ho2=h2o2+b1ol2j 4.00E+11 0.0 16000.0
6824. b1ol+ho2=h2o2+b1ol3j 4.00E+11 0.0 16000.0
6825. b1ol+ho2=h2o2+b1ol4j 1.23E+04 2.5 15750.0
6826. b1ol+ch3=ch4+c4h9o 1.00E+11 0.0 7900.0
6827. b1ol+ch3=ch4+b1ol1j 2.00E+11 0.0 9600.0
6828. b1ol+ch3=ch4+b1ol2j 2.00E+11 0.0 9600.0
6829. b1ol+ch3=ch4+b1ol3j 2.00E+11 0.0 9600.0
6830. b1ol+ch3=ch4+b1ol4j 3.00E-01 4.0 8200.0
6831. b1ol+hco=ch2o+c4h9o 3.40E+04 2.5 13500.0
6832. b1ol+hco=ch2o+b1ol1j 1.00E+07 1.9 17000.0
6833. b1ol+hco=ch2o+b1ol2j 1.00E+07 1.9 17000.0
6834. b1ol+hco=ch2o+b1ol3j 1.00E+07 1.9 17000.0
6835. b1ol+hco=ch2o+b1ol4j 1.00E+05 2.5 18500.0
6836. b1ol+c2h5=c2h6+c4h9o 1.00E+11 0.0 9200.0
6837. b1ol+c2h5=c2h6+b1ol1j 2.00E+11 0.0 11000.0
6838. b1ol+c2h5=c2h6+b1ol2j 2.00E+11 0.0 11000.0
6839. b1ol+c2h5=c2h6+b1ol3j 2.00E+11 0.0 11000.0
6840. b1ol+c2h5=c2h6+b1ol4j 3.00E+11 0.0 13500.0
6841. b1ol+c2h3=c2h4+c4h9o 1.00E+11 0.0 7900.0
6842. b1ol+c2h3=c2h4+b1ol1j 2.00E+11 0.0 9600.0
6843. b1ol+c2h3=c2h4+b1ol2j 2.00E+11 0.0 9600.0
6844. b1ol+c2h3=c2h4+b1ol3j 2.00E+11 0.0 9600.0
6845. b1ol+c2h3=c2h4+b1ol4j 3.00E-01 4.0 8200.0
6846. b1ol+ac3h5=c3h6+c4h9o 1.00E+11 0.0 9200.0
6847. b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol1j 2.00E+11 0.0 11000.0
6848. b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol2j 2.00E+11 0.0 11000.0
6849. b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol3j 2.00E+11 0.0 11000.0
6850. b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol4j 3.00E+11 0.0 13500.0
6851. b1ol1j=b1ol3j 3.30E+09 1.0 43000.0
6852. b1ol1j=b1ol4j 8.60E+08 1.0 26000.0
6853. b1ol4j=b1ol2j 3.30E+09 1.0 37000.0
6854. b1ol3j=ch2oh+c3h6 2.00E+13 0.0 28700.0
6855. b1ol1j=ch3hco+c2h5 2.00E+13 0.0 28700.0
6856. b1ol4j=c2h4+pc2h4oh 2.00E+13 0.0 28700.0
6857. b1ol2j=ch3+c2h3ch2oh 2.00E+13 0.0 31000.0
6858. c4h8+oh=b1ol2j 1.29E+12 0.0 -817.0
6859. c4h9o=ch2o+nc3h7 9.50E+13 0.0 16060.0
6860. c4h9o=>h+nc3h7hco 3.00E+13 0.0 38000.0
6861. b1ol4j=>h+c4h7oh 3.00E+13 0.0 38000.0
6862. b1ol3j=>h+c4h7oh 6.00E+13 0.0 38000.0
6863. b1ol1j+o2=c4h7oh+ho2 1.30E+12 0.0 6000.0
6864. b1ol1j+o2=nc3h7hco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6865. c4h9o+o2=nc3h7hco+ho2 4.00E+10 0.0 1100.0
6866. b1ol2j+o2=c4h7oh+ho2 1.30E+12 0.0 6000.0
6867. b1ol3j+o2=c4h7oh+ho2 1.30E+12 0.0 6000.0
6868. b1ol3j+o2=b1ol3e+ho2 6.50E+11 0.0 6000.0
6869. b1ol4j+o2=b1ol3e+ho2 1.30E+12 0.0 6000.0
6870. c4h7oh=>oh+Cc4h7-1 1.00E+16 0.0 63374.0
6871. b1*o4ol+oh=h2o+b1j*o4ol 2.69E+10 0.8 -340.0
6872. b1*o4ol+h=h2+b1j*o4ol 4.00E+13 0.0 4200.0
6873. b1*o4ol+o=oh+b1j*o4ol 5.00E+12 0.0 1790.0
6874. b1*o4ol+ch3=ch4+b1j*o4ol 1.70E+12 0.0 8440.0
6875. b1*o4ol+ho2=h2o2+b1j*o4ol 2.80E+12 0.0 13600.0

6876. b1*o4ol+o2=ho2+b1j*o4ol 2.00E+13 0.5 42200.0
6877. b1ol3e+oh=b1ol2e4j+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
6878. b1ol3e+o=b1ol2e4j+oh 4.00E+13 0.0 4000.0
6879. b1ol3e+h=b1ol2e4j+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
6880. b1ol3e+ch3=b1ol2e4j+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
6881. b1ol3e+ho2=b1ol2e4j+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
6882. b1ol3e+ch3o2=b1ol2e4j+ch3o2h 2.20E+00 3.5 5675.0
6883. b1ol3e+oh=b1jol3e+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
6884. b1ol3e+o=b1jol3e+oh 1.45E+05 2.5 876.4
6885. b1ol3e+h=b1jol3e+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
6886. b1ol3e+ch3=b1jol3e+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
6887. b1ol3e+ho2=b1jol3e+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
6888. b1ol3e+ch3o2=b1jol3e+ch3o2h 3.00E+12 0.0 17500.0
6889. b1j*o4ol+m=ch2ch2ch2oh+co+m 8.60E+15 0.0 23000.0
6890. c4h6+oh=b1ol2e4j 9.93E+11 0.0 -960.0
6891. b1ol2e4j+o2=ac3h5hco+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
6892. b1jol3e+ho2=ac3h5hco+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
6893. b1jol3e+oh=ac3h5hco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6894. b1jol3e+o=ac3h5hco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6895. b1jol3e+o2=ac3h5hco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6896. b1jol3e+m=ac3h5hco+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
6897. ch2ch2ch2oh=ch2oh+c2h4 2.00E+13 0.0 28700.0
6898. hoc2h4hco+oh=h2o+hoc2h4co 2.69E+10 0.8 -340.0
6899. hoc2h4hco+h=h2+hoc2h4co 4.00E+13 0.0 4200.0
6900. hoc2h4hco+o=oh+hoc2h4co 5.00E+12 0.0 1790.0
6901. hoc2h4hco+ch3=ch4+hoc2h4co 1.70E+12 0.0 8440.0
6902. hoc2h4hco+ho2=h2o2+hoc2h4co 2.80E+12 0.0 13600.0
6903. hoc2h4hco+o2=ho2+hoc2h4co 2.00E+13 0.5 42200.0
6904. hoc2h4co=co+pc2h4oh 2.00E+13 0.0 28700.0
6905. c2h3ch2oh+oh=c2h3choh+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
6906. c2h3ch2oh+o=c2h3choh+oh 1.45E+05 2.5 876.4
6907. c2h3ch2oh+h=c2h3choh+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
6908. c2h3ch2oh+ch3=c2h3choh+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
6909. c2h3ch2oh+ho2=c2h3choh+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
6910. c2h3ch2oh+ch3o2=c2h3choh+ch3o2h 3.00E+12 0.0 17500.0
6911. c2h3choh+ho2=acrol+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
6912. c2h3choh+oh=acrol+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
6913. c2h3choh+o=acrol+oh 1.00E+14 0.0 0.0
6914. c2h3choh+o2=acrol+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
6915. c2h3choh+m=acrol+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
6916. hoch2hco+oh=h2o+hoch2co 2.69E+10 0.8 -340.0
6917. hoch2hco+h=h2+hoch2co 4.00E+13 0.0 4200.0
6918. hoch2hco+o=oh+hoch2co 5.00E+12 0.0 1790.0
6919. hoch2hco+ch3=ch4+hoch2co 1.70E+12 0.0 8440.0
6920. hoch2hco+ho2=h2o2+hoch2co 2.80E+12 0.0 13600.0
6921. hoch2hco+o2=ho2+hoch2co 2.00E+13 0.5 42200.0
6922. hoch2co=co+ch2oh 2.00E+13 0.0 28700.0
6923. c2h3ch2oh=>ac3h5+oh 1.00E+16 0.0 63374.0
6924. nc10h22+phch2=Ac10h21+toluen 7.94E+11 0.0 20500.0
6925. nc10h22+phch2=Bc10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
6926. nc10h22+phch2=Cc10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
6927. nc10h22+phch2=Dc10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
6928. nc10h22+phch2=Ec10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
6929. nc10h22+c6h5=Ac10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 20500.0
6930. nc10h22+c6h5=Bc10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
6931. nc10h22+c6h5=Cc10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
6932. nc10h22+c6h5=Dc10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0

6933. nc10h22+c6h5=Ec10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
6934. cyc6h12+Ac10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.00E+11 0.0 13700.0
6935. cyc6h12+Bc10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6936. cyc6h12+Cc10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6937. cyc6h12+Dc10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6938. cyc6h12+Ec10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6939. cyc6h10+Ac10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.00E+11 0.0 13700.0
6940. cyc6h10+Bc10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6941. cyc6h10+Cc10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6942. cyc6h10+Dc10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6943. cyc6h10+Ec10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
6944. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
6945. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6946. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6947. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6948. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6949. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
6950. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6951. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6952. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6953. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6954. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
6955. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6956. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6957. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6958. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6959. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
6960. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6961. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6962. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6963. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
6964. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Ac10h21 2.00E+12 0.0 18000.0
6965. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Bc10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
6966. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Cc10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
6967. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Dc10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
6968. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Ec10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
6969. Ac5h11+o2=c5h11qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
6970. Bc5h11+o2=c5h11qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
6971. Cc5h11+o2=c5h11qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
6972. c5h11qjA=c5h10rBqA 5.70E+08 1.0 32500.0
6973. c5h11qjA=c5h10rCqA 9.90E+07 1.0 25000.0
6974. c5h11qjA=c5h10rDqA 1.70E+07 1.0 22000.0
6975. c5h11qjA=c5h10rEqA 4.35E+06 1.0 24000.0
6976. c5h11qjB=c5h10rAqB 8.65E+08 1.0 35500.0
6977. c5h11qjB=c5h10rCqB 5.70E+08 1.0 32500.0
6978. c5h11qjB=c5h10rDqB 9.90E+07 1.0 25000.0
6979. c5h11qjB=c5h10rEqB 2.55E+07 1.0 25000.0

6980. c5h11qjC=c5h10rAqC 2.97E+08 1.0 28000.0
6981. c5h11qjC=c5h10rBqC 1.14E+09 1.0 32500.0
6982. c5h11qjA+ho2=nc5h11o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
6983. c5h11qjB+ho2=nc5h11o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
6984. c5h11qjC+ho2=nc5h11o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
6985. c5h10rAqA+o2=c5h10qjAqA 9.00E+18 -2.5 0.0
6986. c5h10rBqA+o2=c5h10qjBqA 1.80E+19 -2.5 0.0
6987. c5h10rCqA+o2=c5h10qjCqA 1.80E+19 -2.5 0.0
6988. c5h10rDqA+o2=c5h10qjDqA 1.70E+19 -2.5 0.0
6989. c5h10rEqA+o2=c5h10qjEqA 9.00E+18 -2.5 0.0
6990. c5h10rAqB+o2=c5h10qjAqB 1.50E+18 -2.5 0.0
6991. c5h10rBqB+o2=c5h10qjBqB 1.80E+19 -2.5 0.0
6992. c5h10rCqB+o2=c5h10qjCqB 1.05E+19 -2.5 0.0
6993. c5h10rDqB+o2=c5h10qjDqB 1.70E+19 -2.5 0.0
6994. c5h10rEqB+o2=c5h10qjEqB 9.00E+18 -2.5 0.0
6995. c5h10rAqC+o2=c5h10qjAqC 9.00E+18 -2.5 0.0
6996. c5h10rBqC+o2=c5h10qjBqC 9.50E+18 -2.5 0.0
6997. c5h10rCqA=>oh+ch2o+c4h8 1.35E+12 0.8 28207.0
6998. c5h10rAqC=>oh+ethco+c2h4 1.12E+14 0.1 30960.0
6999. c5h10rDqB=>oh+ch3hco+c3h6 6.44E+13 0.2 28013.0
7000. c5h10rAqA=oh+nc4h9hco 1.00E+09 0.0 7500.0
7001. c5h10rBqB=oh+c3h7coch3 1.00E+09 0.0 7500.0
7002. c5h10rBqA=oh+c5h10o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
7003. c5h10rCqA=oh+c5h10o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
7004. c5h10rDqA=oh+c5h10o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
7005. c5h10rEqA=oh+c5h10o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
7006. c5h10rAqB=oh+c5h10o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
7007. c5h10rCqB=oh+c5h10o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
7008. c5h10rDqB=oh+c5h10o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
7009. c5h10rEqB=oh+c5h10o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
7010. c5h10rAqC=oh+c5h10o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
7011. c5h10rBqC=oh+c5h10o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
7012. c5h10rAqB=ho2+c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
7013. c5h10rBqA=ho2+c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
7014. c5h10rBqC=ho2+c2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
7015. c5h10rBqC=ho2+t2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
7016. c5h10rCqB=ho2+c2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
7017. c5h10rCqB=ho2+t2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
7018. c5h10qjBqA=oh+c5h9oAqB 3.35E+09 1.0 32500.0
7019. c5h10qjCqA=oh+c5h9oAqC 9.89E+07 1.0 22000.0
7020. c5h10qjDqA=oh+c5h9oAqD 9.89E+07 1.0 22000.0
7021. c5h10qjEqA=oh+c5h9oAqE 1.70E+07 1.0 21000.0
7022. c5h10qjAqB=oh+c5h9oBqA 1.68E+09 1.0 29500.0
7023. c5h10qjCqB=oh+c5h9oBqC 1.68E+09 1.0 29500.0
7024. c5h10qjDqB=oh+c5h9oBqD 2.88E+08 1.0 22000.0
7025. c5h10qjEqB=oh+c5h9oBqE 4.94E+07 1.0 19000.0
7026. c5h10qjAqC=oh+c5h9oCqA 2.88E+08 1.0 22000.0
7027. c5h10qjBqC=oh+c5h9oCqB 1.68E+09 1.0 29500.0
7028. nc5h11o2h=>oh+ch2o+pc4h9 1.50E+16 0.0 42000.0
7029. c5h9oAqA=oh+co2+pc4h9 1.00E+16 0.0 43000.0
7030. c5h9oAqB=oh+hco+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
7031. c5h9oAqC=oh+ch2hco+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
7032. c5h9oAqD=oh+ch3hco+ch2ch2hco 1.00E+16 0.0 43000.0
7033. c5h9oAqE=oh+ch2o+c3h6cho-1 1.00E+16 0.0 43000.0
7034. c5h9oBqA=oh+ch2o+c3h7co 1.00E+16 0.0 43000.0
7035. c5h9oBqC=oh+ch3co+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
7036. c5h9oBqD=oh+ch3hco+ch2coch3 1.00E+16 0.0 43000.0

7037. c5h9oBqE=oh+c2h4+ch3co+ch2o 1.00E+16 0.0 43000.0
7038. c5h9oCqA=oh+c2h5+ch2co+ch2o 1.00E+16 0.0 43000.0
7039. c5h9oCqB=oh+c2h5co+ch3hco 1.00E+16 0.0 43000.0
7040. c5h10o-AB+h=>h2+acrol+c2h5 4.80E+08 1.5 2785.0
7041. c5h10o-AB+oh=>h2o+acrol+c2h5 2.40E+06 2.0 -1192.0
7042. c5h10o-AB+ho2=>h2o2+acrol+c2h5 2.50E+04 2.5 11605.0
7043. c5h10o-AB+h=>h2+nc3h7coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
7044. c5h10o-AB+oh=>h2o+nc3h7coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
7045. c5h10o-AB+ho2=>h2o2+nc3h7coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
7046. c5h10o-BC+h=>h2+ch3+mvk 2.40E+08 1.5 2005.0
7047. c5h10o-BC+oh=>h2o+ch3+mvk 1.20E+06 2.0 -1192.0
7048. c5h10o-BC+ho2=>h2o2+ch3+mvk 1.00E+04 2.5 9400.0
7049. c5h10o-BC+h=>h2+ch3chco+c2h5 2.40E+08 1.5 2005.0
7050. c5h10o-BC+oh=>h2o+ch3chco+c2h5 1.20E+06 2.0 -1192.0
7051. c5h10o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+c2h5 1.00E+04 2.5 9400.0
7052. c5h10o-AC+h=>h2+c4h8+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
7053. c5h10o-AC+oh=>h2o+c4h8+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
7054. c5h10o-AC+ho2=>h2o2+c4h8+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
7055. c5h10o-AC+h=>h2+c2h4+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
7056. c5h10o-AC+oh=>h2o+c2h4+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0
7057. c5h10o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
7058. c5h10o-BD+h=>h2+c3h6+ch3co 4.80E+08 1.5 2005.0
7059. c5h10o-BD+oh=>h2o+c3h6+ch3co 2.40E+06 2.0 -1192.0
7060. c5h10o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+ch3co 2.00E+04 2.5 9400.0
7061. c5h10o-AD+h=>h2+c3h6+ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
7062. c5h10o-AD+oh=>h2o+c3h6+ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
7063. c5h10o-AD+ho2=>h2o2+c3h6+ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
7064. c5h10o-AD+h=>h2+c2h4+ch2cooch3 2.40E+08 1.5 2005.0
7065. c5h10o-AD+oh=>h2o+c2h4+ch2cooch3 1.20E+06 2.0 -1192.0
7066. c5h10o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+ch2cooch3 1.00E+04 2.5 9400.0
7067. c5h10o-AE+h=>h2+c2h4+ch2ch2hco 9.60E+08 1.5 2785.0
7068. c5h10o-AE+oh=>h2o+c2h4+ch2ch2hco 4.80E+06 2.0 -1192.0
7069. c5h10o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+ch2ch2hco 5.00E+04 2.5 11605.0
7070. c4h7hco-1+h=h2+c4h7co-1 4.00E+13 0.0 4200.0
7071. c4h7hco-1+oh=h2o+c4h7co-1 4.20E+12 0.0 500.0
7072. c4h7hco-1+ho2=h2o2+c4h7co-1 1.00E+12 0.0 10000.0
7073. c4h7hco-1+ch3=ch4+c4h7co-1 2.00E-06 5.6 2500.0
7074. c4h7hco-1+c2h5=c2h6+c4h7co-1 1.30E+12 0.0 8500.0
7075. c4h7co-1=>co+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 28700.0
7076. c4h7co-1+ho2=>co2+oh+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 0.0
7077. c4h7hco-2+h=h2+c4h7co-2 4.00E+13 0.0 4200.0
7078. c4h7hco-2+oh=h2o+c4h7co-2 4.20E+12 0.0 500.0
7079. c4h7hco-2+ho2=h2o2+c4h7co-2 1.00E+12 0.0 10000.0
7080. c4h7hco-2+ch3=ch4+c4h7co-2 2.00E-06 5.6 2500.0
7081. c4h7hco-2+c2h5=c2h6+c4h7co-2 1.30E+12 0.0 8500.0
7082. c4h7co-2=>co+Cc4h7-1 2.00E+13 0.0 28700.0
7083. c4h7co-2+ho2=>co2+oh+Cc4h7-1 2.00E+13 0.0 0.0
7084. c3h7coch3+oh=c3h6coch3-1+h2o 2.06E+07 1.7 753.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.60E+06 1.8 20170.0
7085. c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-1+h2o2 2.38E+04 2.5 16490.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.46E+04 2.2 4442.0
7086. c3h7coch3+o=c3h6coch3-1+oh 2.25E+13 0.0 7700.0
7087. c3h7coch3+h=c3h6coch3-1+h2 9.16E+06 2.0 7700.0
7088. c3h7coch3+o2=c3h6coch3-1+ho2 2.05E+13 0.0 51310.0
7089. c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-1+ch4 3.19E+01 3.2 7172.0
7090. c3h7coch3+oh=c3h6coch3-2+h2o 3.62E+07 1.6 -247.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.67E+05 2.0 21660.0

7091. c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-2+h2o2 5.60E+12 0.0 17700.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.37E+11 0.1 8142.0
7092. c3h7coch3+oh=c3h6coch3-3+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.37E+13 -0.3 28700.0
7093. c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-3+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.33E+13 -0.6 6160.0
7094. c3h7coch3+o=c3h6coch3-3+oh 3.07E+13 0.0 3400.0
7095. c3h7coch3+h=c3h6coch3-3+h2 4.46E+06 2.0 3200.0
7096. c3h7coch3+o2=c3h6coch3-3+ho2 1.55E+13 0.0 41970.0
7097. c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-3+ch4 1.74E+00 3.5 3680.0
7098. c3h7coch3+oh=nc3h7coch2+h2o 5.10E+11 0.0 1192.0
Reverse Arrhenius coefficients: 9.29E+13 -0.7 27730.0
7099. c3h7coch3+ho2=nc3h7coch2+h2o2 2.38E+04 2.5 14690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.57E+07 1.5 9762.0
7100. c3h7coch3+o=nc3h7coch2+oh 5.00E+12 0.0 5962.0
7101. c3h7coch3+h=nc3h7coch2+h2 9.30E+12 0.0 6357.0
7102. c3h7coch3+o2=nc3h7coch2+ho2 2.05E+13 0.0 49150.0
7103. c3h7coch3+ch3=nc3h7coch2+ch4 1.62E+11 0.0 9630.0
7104. c3h6coch3-1+o2=ch3coc3h6o2-1 9.00E+18 -2.5 0.0
7105. ch3coc3h6o2-1+ho2=ch3coc3h6o2h-1+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
7106. ch3coc3h6o2h-1=ch3coc3h6o-1+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
7107. ch2o+ch3coc2h4p=ch3coc3h6o-1 1.50E+11 0.0 11900.0
7108. c3h6coch3-1=c2h4+ch2coch3 2.90E+16 -1.2 27000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 8600.0
7109. c3h6coch3-2=c3h6+ch3co 2.72E+16 -1.1 25590.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 7800.0
7110. c3h6coch3-3=mvk+ch3 9.62E+15 -0.8 32390.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 7800.0
7111. nc3h7coch2=nc3h7+ch2co 1.23E+18 -1.4 43450.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 11600.0
7112. nc3h7coch2+o2=nc3h7coch2o2 9.00E+18 -2.5 0.0
7113. nc3h7coch2o2+ho2=nc3h7coch2o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
7114. nc3h7coch2o2h=nc3h7coch2o+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
7115. ch2o+ch3hco=nc3h7coch2o 1.50E+11 0.0 11900.0
7116. c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4p+h2o 1.05E+10 1.0 1586.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.19E+09 0.9 21030.0
7117. c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4p+h2o2 4.76E+04 2.5 16490.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+04 2.2 4472.0
7118. c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4p+ho2 4.10E+13 0.0 51310.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.95E+10 0.3 -1882.0
7119. c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4p+h2 1.83E+07 2.0 7700.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.79E+05 2.0 11990.0
7120. c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4s+h2o 1.69E+12 0.0 -228.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.30E+13 -0.3 28740.0
7121. c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4s+h2o2 4.00E+11 0.0 8698.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.63E+13 -0.7 6200.0
7122. c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4s+ho2 3.10E+13 0.0 41970.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.54E+12 0.0 -1702.0
7123. c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4s+h2 8.96E+06 2.0 3200.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.04E+07 1.7 17010.0
7124. c2h5coc2h4s=c2h5coc2h3+h 8.70E+16 -0.8 42130.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.30E+13 0.0 1560.0
7125. c2h5coc2h4p=c2h5co+c2h4 1.55E+17 -1.5 27840.0
Reverse Arrhenius coefficients: 7.00E+10 0.0 9600.0
7126. c2h5coc2h4p+o2=c2h5coc2h4o2 9.00E+18 -2.5 0.0
7127. c2h5coc2h4o2+ho2=c2h5coc2h4o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
7128. c2h5coc2h4o2h=c2h5coc2h4o+oh 1.50E+16 0.0 42500.0

7129. ch2o+c2h5coch2=c2h5coc2h4o 1.50E+11 0.0 11900.0
7130. c2h5coc2h3=>c2h3+c2h5co 7.94E+17 0.0 84456.0
7131. c2h5coc2h3=>c2h3co+c2h5 7.94E+17 0.0 84456.0
7132. c2h5coc2h3+oh=c2h5coch2+ch2o 1.00E+10 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.67E+11 -0.4 18220.0
7133. c2h5coc2h3+ho2=c2h5co+ch2hco+oh 6.03E+09 0.0 7949.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+00 0.0 0.0
7134. c2h5coc2h3+ch3o2=c2h5co+ch2hco+ch3o 3.97E+11 0.0 17050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+00 0.0 0.0
7135. c2h5coc2h3+oh=pc2h4coc2h3+h2o 7.55E+09 1.0 1586.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.28E+08 2.5 20210.0
7136. c2h5coc2h3+ho2=pc2h4coc2h3+h2o2 2.38E+04 2.5 16490.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.40E+03 3.8 3652.0
7137. c2h5coc2h3+ch3o2=pc2h4coc2h3+ch3o2h 3.01E+12 0.0 19380.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.25E+12 1.1 5822.0
7138. c2h5coc2h3+o2=pc2h4coc2h3+ho2 2.05E+13 0.0 51310.0
7139. c2h5coc2h3+h=pc2h4coc2h3+h2 9.16E+06 2.0 7700.0
7140. c2h5coc2h3+c2h3=pc2h4coc2h3+c2h4 5.00E+11 0.0 10400.0
7141. c2h5coc2h3+c2h5=pc2h4coc2h3+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
7142. c2h5coc2h3+ch3o=pc2h4coc2h3+ch3oh 2.17E+11 0.0 6460.0
7143. c2h5coc2h3+oh=sc2h4coc2h3+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.35E+13 -0.2 28600.0
7144. c2h5coc2h3+ho2=sc2h4coc2h3+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.90E+13 -0.5 6065.0
7145. c2h5coc2h3+ch3o2=sc2h4coc2h3+ch3o2h 2.00E+12 0.0 15250.0
Reverse Arrhenius coefficients: 7.79E+14 -0.7 11900.0
7146. c2h5coc2h3+o2=sc2h4coc2h3+ho2 1.55E+13 0.0 41970.0
7147. c2h5coc2h3+h=sc2h4coc2h3+h2 4.48E+06 2.0 3200.0
7148. c2h5coc2h3+c2h3=sc2h4coc2h3+c2h4 3.00E+11 0.0 5600.0
7149. c2h5coc2h3+c2h5=sc2h4coc2h3+c2h6 3.00E+10 0.0 8600.0
7150. c2h5coc2h3+ch3o=sc2h4coc2h3+ch3oh 1.45E+11 0.0 2771.0
7151. pc2h4coc2h3=c2h3co+c2h4 5.26E+14 0.4 21460.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.00E+10 0.0 11300.0
7152. sc2h4coc2h3=ch3chco+c2h3 1.64E+16 -0.7 54590.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.00E+10 0.0 12600.0
7153. c2h3+c2h3co=divinket 3.12E+14 -0.5 0.0
7154. c4h8hco-2=c3h6+ch2hco 2.00E+13 0.0 24367.3
7155. c4h8hco-2+o2=c4h7hco-1+ho2 7.50E+09 0.0 -2000.0
7156. c4h8hco-2+o2=c4h7hco-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
7157. Ac6h13+o2=c6h13qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
7158. Bc6h13+o2=c6h13qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
7159. Cc6h13+o2=c6h13qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
7160. Ac6h13+ho2=c6h13ojA+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
7161. Bc6h13+ho2=c6h13ojB+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
7162. Cc6h13+ho2=c6h13ojC+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
7163. Ac6h13+ch3o2=c6h13ojA+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7164. Bc6h13+ch3o2=c6h13ojB+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7165. Cc6h13+ch3o2=c6h13ojC+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7166. Ac6h13+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7167. Bc6h13+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7168. Cc6h13+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7169. Ac6h13+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7170. Bc6h13+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7171. Cc6h13+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
7172. Ac6h13+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
7173. Ac6h13+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
7174. Ac6h13+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
7175. Bc6h13+c6h13qjA=c6h13ojB+c6h13ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
7176. Bc6h13+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
7177. Bc6h13+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
7178. Cc6h13+c6h13qjA=c6h13ojC+c6h13ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
7179. Cc6h13+c6h13qjB=c6h13ojC+c6h13ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
7180. Cc6h13+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
7181. c6h13ojA=ch2o+Ac5h11 7.17E+17 -1.3 15013.0
7182. c6h13ojB=ch3hco+pc4h9 4.18E+12 0.4 10821.0
7183. c6h13ojB=ch3+nc4h9hco 7.00E+11 0.6 15365.0
7184. c6h13ojC=ethco+nc3h7 5.28E+12 0.4 10946.0
7185. c6h13ojC=c2h5+nc3h7hco 2.37E+16 -0.6 10837.0
7186. c6h13qA=oh+c6h13ojA 1.50E+16 0.0 42500.0
7187. c6h13qB=oh+c6h13ojB 1.25E+16 0.0 41600.0
7188. c6h13qC=oh+c6h13ojC 1.25E+16 0.0 41600.0
7189. c6h13qjA=c6h12rBqA 5.70E+08 1.0 32500.0
7190. c6h13qjA=c6h12rCqA 9.90E+07 1.0 25000.0
7191. c6h13qjA=c6h12rDqA 1.70E+07 1.0 22000.0
7192. c6h13qjA=c6h12rEqA 2.90E+06 1.0 21000.0
7193. c6h13qjB=c6h12rAqB 8.65E+08 1.0 35500.0
7194. c6h13qjB=c6h12rCqB 5.70E+08 1.0 32500.0
7195. c6h13qjB=c6h12rDqB 9.90E+07 1.0 25000.0
7196. c6h13qjB=c6h12rEqB 1.70E+07 1.0 22000.0
7197. c6h13qjB=c6h12rFqB 4.35E+06 1.0 24000.0
7198. c6h13qjC=c6h12rAqC 1.48E+08 1.0 28000.0
7199. c6h13qjC=c6h12rBqC 5.70E+08 1.0 32500.0
7200. c6h13qjC=c6h12rDqC 5.70E+08 1.0 32500.0
7201. c6h13qjC=c6h12rEqC 9.90E+07 1.0 25000.0
7202. c6h13qjC=c6h12rFqC 2.53E+07 1.0 25000.0
7203. c6h13qjA+ho2=c6h13qA+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
7204. c6h13qjB+ho2=c6h13qB+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
7205. c6h13qjC+ho2=c6h13qC+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
7206. c6h13qjA+ho2=c6h13ojA+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7207. c6h13qjB+ho2=c6h13ojB+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7208. c6h13qjC+ho2=c6h13ojC+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7209. c6h13qjA+ch3o2=c6h13ojA+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7210. c6h13qjB+ch3o2=c6h13ojB+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7211. c6h13qjC+ch3o2=c6h13ojC+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7212. c6h13qjA+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7213. c6h13qjB+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7214. c6h13qjC+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7215. c6h13qjA+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7216. c6h13qjB+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7217. c6h13qjC+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7218. c6h13qjA+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7219. c6h13qjA+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7220. c6h13qjA+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7221. c6h13qjB+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7222. c6h13qjB+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7223. c6h13qjC+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
7224. c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA 1.70E+19 -2.5 0.0
7225. c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA 1.80E+19 -2.5 0.0
7226. c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA 1.80E+19 -2.5 0.0
7227. c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA 1.70E+19 -2.5 0.0
7228. c6h12rAqB+o2=c6h12qjAqB 9.00E+18 -2.5 0.0
7229. c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB 1.80E+19 -2.5 0.0
7230. c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB 1.80E+19 -2.5 0.0
7231. c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB 1.70E+19 -2.5 0.0
7232. c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB 9.00E+18 -2.5 0.0
7233. c6h12rAqC+o2=c6h12qjAqC 9.00E+18 -2.5 0.0
7234. c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC 1.70E+19 -2.5 0.0
7235. c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC 1.80E+19 -2.5 0.0
7236. c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC 1.70E+19 -2.5 0.0
7237. c6h12rFqC+o2=c6h12qjFqC 9.00E+18 -2.5 0.0
7238. c6h12rAqC=>oh+c2h4+nc3h7hco 5.00E+13 0.0 25500.0
7239. c6h12rCqA=>oh+ch2o+c5h10 5.00E+13 0.0 25500.0
7240. c6h12rDqB=>oh+ch3hco+c4h8 5.00E+13 0.0 25500.0
7241. c6h12rEqC=>oh+c3h6+ethco 5.00E+13 0.0 25500.0
7242. c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
7243. c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
7244. c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
7245. c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
7246. c6h12rAqB=oh+c6h12o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
7247. c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
7248. c6h12rDqB=oh+c6h12o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
7249. c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
7250. c6h12rFqB=oh+c6h12o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
7251. c6h12rBqC=oh+c6h12o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
7252. c6h12rAqC=oh+c6h12o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
7253. c6h12rDqC=oh+c6h12o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
7254. c6h12rEqC=oh+c6h12o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
7255. c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
7256. ho2+c6h12-1=c6h12rBqA 1.50E+11 0.0 7800.0
7257. ho2+c6h12-1=c6h12rAqB 1.50E+11 0.0 7800.0
7258. ho2+c6h12-2=c6h12rBqC 1.50E+11 0.0 7800.0
7259. ho2+c6h12-2=c6h12rCqB 1.50E+11 0.0 7800.0
7260. ho2+c6h12-3=c6h12rDqC 1.50E+11 0.0 7800.0
7261. c6h12qjBqA=oh+c6h11oAqB 3.35E+09 1.0 33500.0
7262. c6h12qjCqA=oh+c6h11oAqC 5.75E+08 1.0 26000.0
7263. c6h12qjDqA=oh+c6h11oAqD 9.89E+07 1.0 23000.0
7264. c6h12qjEqA=oh+c6h11oAqE 1.70E+07 1.0 22000.0
7265. c6h12qjAqB=oh+c6h11oBqA 1.68E+09 1.0 30500.0
7266. c6h12qjCqB=oh+c6h11oBqC 1.68E+09 1.0 30500.0
7267. c6h12qjDqB=oh+c6h11oBqD 2.88E+08 1.0 23000.0
7268. c6h12qjEqB=oh+c6h11oBqE 4.94E+07 1.0 20000.0
7269. c6h12qjFqB=oh+c6h11oBqF 8.50E+06 1.0 19000.0
7270. c6h12qjAqC=oh+c6h11oCqA 2.88E+08 1.0 23000.0
7271. c6h12qjBqC=oh+c6h11oCqB 1.68E+09 1.0 30500.0
7272. c6h12qjDqC=oh+c6h11oCqD 1.68E+09 1.0 30500.0
7273. c6h12qjEqC=oh+c6h11oCqE 2.88E+08 1.0 23000.0
7274. c6h12qjFqC=oh+c6h11oCqF 4.94E+07 1.0 20000.0
7275. c6h11oAqB=>oh+hco+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
7276. c6h11oAqC=>oh+ch2hco+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
7277. c6h11oAqD=>oh+ethco+ch2ch2hco 1.00E+16 0.0 43000.0
7278. c6h11oAqE=>oh+ch3hco+c3h6cho-1 1.00E+16 0.0 43000.0
7279. c6h11oBqA=>oh+ch2o+nc4h9co 1.00E+16 0.0 43000.0
7280. c6h11oBqC=>oh+ch3co+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
7281. c6h11oBqD=>oh+ethco+ch2coch3 1.00E+16 0.0 43000.0
7282. c6h11oBqE=>oh+ch3hco+ch3coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
7283. c6h11oBqF=>oh+ch2o+c3h6coch3-1 1.00E+16 0.0 43000.0
7284. c6h11oCqA=>oh+ch2o+nc3h7coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
7285. c6h11oCqB=>oh+ch3hco+c3h7co 1.00E+16 0.0 43000.0
7286. c6h11oCqD=>oh+ethco+c2h5co 1.00E+16 0.0 43000.0
7287. c6h11oCqE=>oh+ch3hco+c2h5coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
7288. c6h11oCqF=>oh+ch2o+c2h5coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
7289. c6h12o-AB+h=>h2+acrol+nc3h7 4.80E+08 1.5 2785.0
7290. c6h12o-AB+oh=>h2o+acrol+nc3h7 2.40E+06 2.0 -1192.0
7291. c6h12o-AB+ho2=>h2o2+acrol+nc3h7 2.50E+04 2.5 11605.0
7292. c6h12o-AB+h=>h2+ch2co+pc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
7293. c6h12o-AB+oh=>h2o+ch2co+pc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
7294. c6h12o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+pc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
7295. c6h12o-BC+h=>h2+mvk+c2h5 2.40E+08 1.5 2005.0
7296. c6h12o-BC+oh=>h2o+mvk+c2h5 1.20E+06 2.0 -1192.0
7297. c6h12o-BC+ho2=>h2o2+mvk+c2h5 1.00E+04 2.5 9400.0
7298. c6h12o-BC+h=>h2+ch3chco+nc3h7 2.40E+08 1.5 2005.0
7299. c6h12o-BC+oh=>h2o+ch3chco+nc3h7 1.20E+06 2.0 -1192.0
7300. c6h12o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+nc3h7 1.00E+04 2.5 9400.0
7301. c6h12o-CD+h=>h2+ch3+c2h5coc2h3 4.80E+08 1.5 2005.0
7302. c6h12o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h5coc2h3 2.40E+06 2.0 -1192.0
7303. c6h12o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h5coc2h3 2.00E+04 2.5 9400.0
7304. c6h12o-AC+h=>h2+c5h10+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
7305. c6h12o-AC+oh=>h2o+c5h10+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
7306. c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c5h10+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
7307. c6h12o-AC+h=>h2+c2h4+c3h7co 2.40E+08 1.5 2005.0
7308. c6h12o-AC+oh=>h2o+c2h4+c3h7co 1.20E+06 2.0 -1192.0
7309. c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c3h7co 1.00E+04 2.5 9400.0
7310. c6h12o-BD+h=>h2+c4h8+ch3co 2.40E+08 1.5 2005.0
7311. c6h12o-BD+oh=>h2o+c4h8+ch3co 1.20E+06 2.0 -1192.0
7312. c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c4h8+ch3co 1.00E+04 2.5 9400.0
7313. c6h12o-BD+h=>h2+c3h6+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
7314. c6h12o-BD+oh=>h2o+c3h6+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0
7315. c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
7316. c6h12o-AD+h=>h2+c4h8+ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
7317. c6h12o-AD+oh=>h2o+c4h8+ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
7318. c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c4h8+ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
7319. c6h12o-AD+h=>h2+c2h4+c2h5coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
7320. c6h12o-AD+oh=>h2o+c2h4+c2h5coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
7321. c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
7322. c6h12o-BE+h=>h2+c3h6+ch2coch3 4.80E+08 1.5 2005.0
7323. c6h12o-BE+oh=>h2o+c3h6+ch2coch3 2.40E+06 2.0 -1192.0
7324. c6h12o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2coch3 1.00E+04 2.5 9400.0
7325. c6h12o-AE+h=>h2+c3h6+ch2ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
7326. c6h12o-AE+oh=>h2o+c3h6+ch2ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
7327. c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
7328. c6h12o-AE+h=>h2+c2h4+ch3coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
7329. c6h12o-AE+oh=>h2o+c2h4+ch3coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
7330. c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+ch3coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
7331. hexanone+h=>h2+ch2co+pc4h9 2.70E+07 2.0 5000.0
7332. hexanone+oh=>h2o+ch2co+pc4h9 7.80E+06 2.0 -765.0
7333. hexanone+ho2=>h2o2+ch2co+pc4h9 1.20E+12 0.0 15500.0
7334. hexanone+ch3=>ch4+ch2co+pc4h9 6.00E+11 0.0 9600.0
7335. hexanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+pc4h9 6.00E+11 0.0 9600.0
7336. hexanone+c2h5=>c2h6+ch2co+pc4h9 6.00E+11 0.0 11000.0
7337. Ac7h15+o2=c7h15qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
7338. Bc7h15+o2=c7h15qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
7339. Cc7h15+o2=c7h15qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
7340. Dc7h15+o2=c7h15qjD 1.80E+19 -2.5 0.0
7341. Ac7h15+ho2=c7h15ojA+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
7342. Bc7h15+ho2=c7h15ojB+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
7343. Cc7h15+ho2=c7h15ojC+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
7344. Dc7h15+ho2=c7h15ojD+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
7345. Ac7h15+ch3o2=c7h15ojA+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0

7346. Bc7h15+ch3o2=c7h15ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7347. Cc7h15+ch3o2=c7h15ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7348. Dc7h15+ch3o2=c7h15ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7349. Ac7h15+c2h5o2=c7h15ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7350. Bc7h15+c2h5o2=c7h15ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7351. Cc7h15+c2h5o2=c7h15ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7352. Dc7h15+c2h5o2=c7h15ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7353. Ac7h15+nc3h7o2=c7h15ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7354. Bc7h15+nc3h7o2=c7h15ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7355. Cc7h15+nc3h7o2=c7h15ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7356. Dc7h15+nc3h7o2=c7h15ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7357. Ac7h15+ic3h7o2=c7h15ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7358. Bc7h15+ic3h7o2=c7h15ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7359. Cc7h15+ic3h7o2=c7h15ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7360. Dc7h15+ic3h7o2=c7h15ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7361. Ac7h15+c7h15qjA=2c7h15ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7362. Bc7h15+c7h15qjA=c7h15ojB+c7h15ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7363. Cc7h15+c7h15qjA=c7h15ojC+c7h15ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7364. Dc7h15+c7h15qjA=c7h15ojD+c7h15ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7365. Ac7h15+c7h15qjB=c7h15ojA+c7h15ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7366. Bc7h15+c7h15qjB=2c7h15ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7367. Cc7h15+c7h15qjB=c7h15ojC+c7h15ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7368. Dc7h15+c7h15qjB=c7h15ojD+c7h15ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7369. Ac7h15+c7h15qjC=c7h15ojA+c7h15ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7370. Bc7h15+c7h15qjC=c7h15ojB+c7h15ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7371. Cc7h15+c7h15qjC=2c7h15ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7372. Dc7h15+c7h15qjC=c7h15ojD+c7h15ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7373. Ac7h15+c7h15qjD=c7h15ojA+c7h15ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7374. Bc7h15+c7h15qjD=c7h15ojB+c7h15ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7375. Cc7h15+c7h15qjD=c7h15ojC+c7h15ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7376. Dc7h15+c7h15qjD=2c7h15ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7377. c7h15ojA=ch2o+Ac6h13	4.72E+19	-1.9	14898.5
7378. c7h15ojB=ch3hco+Ac5h11	8.06E+09	1.2	9903.0
7379. c7h15ojB=ch3+c5h11hco	5.10E+11	0.6	15328.0
7380. c7h15ojC=ethco+pc4h9	1.81E+12	0.5	10510.0
7381. c7h15ojC=c2h5+nc4h9hco	1.53E+14	0.0	10260.0
7382. c7h15ojD=nc3h7+nc3h7hco	7.35E+15	-0.3	11711.0
7383. c7h15qA=oh+c7h15ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
7384. c7h15qB=oh+c7h15ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
7385. c7h15qC=oh+c7h15ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
7386. c7h15qD=oh+c7h15ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
7387. c7h15qjA=c7h14rBqA	5.70E+08	1.0	32500.0
7388. c7h15qjA=c7h14rCqA	9.90E+07	1.0	25000.0
7389. c7h15qjA=c7h14rDqA	1.70E+07	1.0	22000.0
7390. c7h15qjA=c7h14rEqA	2.90E+06	1.0	21000.0
7391. c7h15qjB=c7h14rAqB	8.65E+08	1.0	35500.0
7392. c7h15qjB=c7h14rCqB	5.70E+08	1.0	32500.0
7393. c7h15qjB=c7h14rDqB	9.90E+07	1.0	25000.0
7394. c7h15qjB=c7h14rEqB	1.70E+07	1.0	22000.0
7395. c7h15qjB=c7h14rFqB	2.90E+06	1.0	21000.0
7396. c7h15qjC=c7h14rAqC	1.48E+08	1.0	28000.0
7397. c7h15qjC=c7h14rBqC	5.70E+08	1.0	32500.0
7398. c7h15qjC=c7h14rDqC	5.70E+08	1.0	32500.0
7399. c7h15qjC=c7h14rEqC	9.90E+07	1.0	25000.0
7400. c7h15qjC=c7h14rFqC	1.70E+07	1.0	22000.0
7401. c7h15qjC=c7h14rGqC	2.55E+07	1.0	24000.0
7402. c7h15qjD=c7h14rAqD	5.06E+07	1.0	25000.0
7403. c7h15qjD=c7h14rBqD	1.98E+08	1.0	25000.0
7404. c7h15qjD=c7h14rCqD	1.14E+09	1.0	32500.0
7405. c7h15qjA+ho2=c7h15qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7406. c7h15qjD+ho2=c7h15qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7407. c7h15qjC+ho2=c7h15qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7408. c7h15qjB+ho2=c7h15qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7409. c7h15qjA+ho2=c7h15ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7410. c7h15qjD+ho2=c7h15ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7411. c7h15qjC+ho2=c7h15ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7412. c7h15qjB+ho2=c7h15ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7413. c7h15qjA+ch3o2=c7h15ojA+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7414. c7h15qjD+ch3o2=c7h15ojB+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7415. c7h15qjC+ch3o2=c7h15ojC+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7416. c7h15qjB+ch3o2=c7h15ojD+ch3o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7417. c7h15qjA+c2h5o2=c7h15ojA+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7418. c7h15qjD+c2h5o2=c7h15ojB+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7419. c7h15qjC+c2h5o2=c7h15ojC+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7420. c7h15qjB+c2h5o2=c7h15ojD+c2h5o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7421. c7h15qjA+nc3h7o2=c7h15ojA+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7422. c7h15qjD+nc3h7o2=c7h15ojB+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7423. c7h15qjC+nc3h7o2=c7h15ojC+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7424. c7h15qjB+nc3h7o2=c7h15ojD+nc3h7o+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7425. c7h15qjA+c7h15qjA=c7h15ojA+c7h15ojA+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7426. c7h15qjA+c7h15qjB=c7h15ojA+c7h15ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7427. c7h15qjA+c7h15qjC=c7h15ojA+c7h15ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7428. c7h15qjA+c7h15qjD=c7h15ojA+c7h15ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7429. c7h15qjB+c7h15qjB=c7h15ojB+c7h15ojB+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7430. c7h15qjB+c7h15qjC=c7h15ojB+c7h15ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7431. c7h15qjB+c7h15qjD=c7h15ojB+c7h15ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7432. c7h15qjC+c7h15qjC=c7h15ojC+c7h15ojC+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7433. c7h15qjC+c7h15qjD=c7h15ojC+c7h15ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7434. c7h15qjD+c7h15qjD=c7h15ojD+c7h15ojD+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7435. c7h14rDqA=c5h10+c2h4o2h	2.00E+13	0.0	28700.0
7436. c7h14rEqA=c4h8+c3h6ooh1-3	2.00E+13	0.0	28700.0
7437. c7h14rEqB=c4h8+c3h6ooh2-1	2.00E+13	0.0	28700.0
7438. c7h14rFqB=c3h6+c4h82ooh4j	2.00E+13	0.0	28700.0
7439. c7h14rFqC=c3h6+c4h82ooh1j	2.00E+13	0.0	28700.0
7440. c7h14rGqC=c2h4+c5h10rAqC	2.00E+13	0.0	28700.0
7441. c7h14rAqD=c2h4+c5h10rAqB	2.00E+13	0.0	28700.0
7442. c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7443. c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7444. c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7445. c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7446. c7h14rAqB+o2=c7h14qjAqB	1.50E+18	-2.5	0.0
7447. c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB	1.05E+19	-2.5	0.0
7448. c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7449. c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7450. c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB	1.70E+19	-2.5	0.0
7451. c7h14rAqC+o2=c7h14qjAqC	9.00E+18	-2.5	0.0
7452. c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC	9.50E+18	-2.5	0.0
7453. c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC	1.05E+19	-2.5	0.0
7454. c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7455. c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC	1.70E+19	-2.5	0.0
7456. c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC	9.00E+18	-2.5	0.0
7457. c7h14rAqD+o2=c7h14qjAqD	9.00E+18	-2.5	0.0
7458. c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD	1.70E+19	-2.5	0.0
7459. c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD	1.05E+19	-2.5	0.0
7460. c7h14rAqC=oh+c2h4+nc4h9hco	2.66E+04	3.0	24773.0
7461. c7h14rCqA=oh+ch2o+c6h12-1	1.47E+13	0.4	28543.0
7462. c7h14rBqD=oh+nc3h7hco+c3h6	4.72E+03	3.3	23974.0
7463. c7h14rDqB=oh+ch3hco+c5h10	1.42E+05	2.9	24777.0
7464. c7h14rEqC=oh+ethco+c4h8	3.96E+04	3.1	24093.0
7465. c7h14rBqA=oh+c7h14o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
7466. c7h14rCqA=oh+c7h14o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
7467. c7h14rDqA=oh+c7h14o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
7468. c7h14rEqA=oh+c7h14o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
7469. c7h14rAqB=oh+c7h14o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
7470. c7h14rCqB=oh+c7h14o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
7471. c7h14rDqB=oh+c7h14o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
7472. c7h14rEqB=oh+c7h14o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
7473. c7h14rFqB=oh+c7h14o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
7474. c7h14rBqC=oh+c7h14o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
7475. c7h14rAqC=oh+c7h14o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
7476. c7h14rDqC=oh+c7h14o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
7477. c7h14rEqC=oh+c7h14o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
7478. c7h14rFqC=oh+c7h14o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
7479. c7h14rGqC=oh+c7h14o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
7480. c7h14rCqD=oh+c7h14o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
7481. c7h14rBqD=oh+c7h14o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
7482. c7h14rAqD=oh+c7h14o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
7483. ho2+c7h14-1=c7h14rAqB	1.50E+11	0.0	7800.0
7484. ho2+c7h14-1=c7h14rBqA	1.50E+11	0.0	7800.0
7485. ho2+c7h14-2=c7h14rBqC	1.50E+11	0.0	7800.0
7486. ho2+c7h14-2=c7h14rCqB	1.50E+11	0.0	7800.0
7487. ho2+c7h14-3=c7h14rCqD	1.50E+11	0.0	7800.0
7488. ho2+c7h14-3=c7h14rDqC	1.50E+11	0.0	7800.0
7489. c7h14qjBqA=>oh+c7h13oAqB	3.35E+09	1.0	33500.0
7490. c7h14qjCqA=>oh+c7h13oAqC	5.75E+08	1.0	26000.0
7491. c7h14qjDqA=>oh+c7h13oAqD	9.89E+07	1.0	23000.0
7492. c7h14qjEqA=>oh+c7h13oAqE	1.70E+07	1.0	22000.0
7493. c7h14qjAqB=>oh+c7h13oBqA	1.68E+09	1.0	30500.0
7494. c7h14qjCqB=>oh+c7h13oBqC	1.68E+09	1.0	30500.0
7495. c7h14qjDqB=>oh+c7h13oBqD	2.88E+08	1.0	23000.0
7496. c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBqE	4.94E+07	1.0	20000.0
7497. c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBqF	8.50E+06	1.0	19000.0
7498. c7h14qjAqC=>oh+c7h13oCqA	2.88E+08	1.0	23000.0
7499. c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB	1.68E+09	1.0	30500.0
7500. c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD	1.68E+09	1.0	30500.0
7501. c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE	2.88E+08	1.0	23000.0
7502. c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF	4.94E+07	1.0	20000.0
7503. c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG	8.50E+06	1.0	19000.0
7504. c7h14qjAqD=>oh+c7h13oDqA	4.94E+07	1.0	20000.0
7505. c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB	2.88E+08	1.0	23000.0
7506. c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC	1.68E+09	1.0	30500.0
7507. c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7508. c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7509. c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7510. c7h13oAqE=>oh+ethco+c3h6cho-1	1.00E+16	0.0	43000.0
7511. c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
7512. c7h13oBqC=>oh+ch3co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7513. c7h13oBqD=>oh+nc3h7hco+ch2cooch3	1.00E+16	0.0	43000.0
7514. c7h13oBqE=>oh+ch3coc2h4p+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
7515. c7h13oBqF=>oh+ch3hco+c3h6cooch3-1	1.00E+16	0.0	43000.0
7516. c7h13oCqA=>oh+ch2o+nc4h9cooch2	1.00E+16	0.0	43000.0
7517. c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
7518. c7h13oCqD=>oh+c2h5co+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7519. c7h13oCqE=>oh+c2h5cooch2+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
7520. c7h13oCqF=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
7521. c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h5coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
7522. c7h13oDqA=>oh+ch2o+nc3h7coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
7523. c7h13oDqB=>oh+ch3hco+nc3h7cooch2	1.00E+16	0.0	43000.0
7524. c7h13oDqC=>oh+ethco+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
7525. c7h14o-AB+h=>h2+acrol+pc4h9	4.80E+08	1.5	2785.0
7526. c7h14o-AB+oh=>h2o+acrol+pc4h9	2.40E+06	2.0	-1192.0
7527. c7h14o-AB+ho2=>h2o2+acrol+pc4h9	2.50E+04	2.5	11605.0
7528. c7h14o-AB+h=>h2+nc5h11cooch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7529. c7h14o-AB+oh=>h2o+nc5h11cooch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7530. c7h14o-AB+ho2=>h2o2+nc5h11cooch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7531. c7h14o-BC+h=>h2+mvk+nc3h7	2.40E+08	1.5	2005.0
7532. c7h14o-BC+oh=>h2o+mvk+nc3h7	1.20E+06	2.0	-1192.0
7533. c7h14o-BC+ho2=>h2o2+mvk+nc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
7534. c7h14o-BC+h=>h2+ch3chco+pc4h9	2.40E+08	1.5	2005.0
7535. c7h14o-BC+oh=>h2o+ch3chco+pc4h9	1.20E+06	2.0	-1192.0
7536. c7h14o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+pc4h9	1.00E+04	2.5	9400.0
7537. c7h14o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+c2h5	2.40E+08	1.5	2005.0
7538. c7h14o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+c2h5	1.20E+06	2.0	-1192.0
7539. c7h14o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+c2h5	1.00E+04	2.5	9400.0
7540. c7h14o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc3h7	2.40E+08	1.5	2005.0
7541. c7h14o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc3h7	1.20E+06	2.0	-1192.0
7542. c7h14o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
7543. c7h14o-AC+h=>h2+hco+c6h12-1	4.80E+08	1.5	2785.0
7544. c7h14o-AC+oh=>h2o+hco+c6h12-1	2.40E+06	2.0	-1192.0
7545. c7h14o-AC+ho2=>h2o2+hco+c6h12-1	2.50E+04	2.5	11605.0
7546. c7h14o-AC+h=>h2+nc4h9coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7547. c7h14o-AC+oh=>h2o+nc4h9coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7548. c7h14o-AC+ho2=>h2o2+nc4h9coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7549. c7h14o-BD+h=>h2+c5h10+ch3co	2.40E+08	1.5	2005.0
7550. c7h14o-BD+oh=>h2o+c5h10+ch3co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7551. c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c5h10+ch3co	1.00E+04	2.5	9400.0
7552. c7h14o-BD+h=>h2+c3h6+c3h7co	2.40E+08	1.5	2005.0
7553. c7h14o-BD+oh=>h2o+c3h6+c3h7co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7554. c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c3h7co	1.00E+04	2.5	9400.0
7555. c7h14o-CE+h=>h2+c4h8+c2h5co	4.80E+08	1.5	2005.0
7556. c7h14o-CE+oh=>h2o+c4h8+c2h5co	2.40E+06	2.0	-1192.0
7557. c7h14o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5co	1.00E+04	2.5	9400.0
7558. c7h14o-AD+h=>h2+ch2hco+c5h10	4.80E+08	1.5	2785.0
7559. c7h14o-AD+oh=>h2o+ch2hco+c5h10	2.40E+13	0.0	5955.0
7560. c7h14o-AD+ho2=>h2o2+ch2hco+c5h10	2.50E+04	2.5	11605.0
7561. c7h14o-AD+h=>h2+nc3h7coc3h6-1	2.40E+08	1.5	2005.0
7562. c7h14o-AD+oh=>h2o+nc3h7coc3h6-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
7563. c7h14o-AD+ho2=>h2o2+nc3h7coc3h6-1	1.00E+04	2.5	9400.0
7564. c7h14o-BE+h=>h2+c4h8+ch2cooch3	2.40E+08	1.5	2005.0
7565. c7h14o-BE+oh=>h2o+c4h8+ch2cooch3	1.20E+06	2.0	-1192.0
7566. c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c4h8+ch2cooch3	1.00E+04	2.5	9400.0
7567. c7h14o-BE+h=>h2+c3h6+c2h5cooch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7568. c7h14o-BE+oh=>h2o+c3h6+c2h5cooch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7569. c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5cooch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7570. c7h14o-AE+h=>h2+ch2ch2hco+c4h8	4.80E+08	1.5	2785.0
7571. c7h14o-AE+oh=>h2o+ch2ch2hco+c4h8	2.40E+06	2.0	-1192.0
7572. c7h14o-AE+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c4h8	2.50E+04	2.5	11605.0
7573. c7h14o-AE+h=>h2+c2h4+c2h5coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0

7574.	c7h14o-AE+oh=>h2o+c2h4+c2h5coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7575.	c7h14o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7576.	c7h14o-BF+h=>h2+ch2co+ch3h6coch3-1	4.80E+08	1.5	2005.0
7577.	c7h14o-BF+oh=>h2o+c2h4+ch3h6coch3-1	2.40E+06	2.0	-1192.0
7578.	c7h14o-BF+ho2=>h2o2+c2h4+ch3h6coch3-1	1.00E+04	2.5	9400.0
7579.	c7h14-1+ho2=oh+c7h14o-AB	1.00E+12	0.0	14400.0
7580.	c7h14-2+ho2=oh+c7h14o-BC	1.00E+12	0.0	14400.0
7581.	c7h14-3+ho2=oh+c7h14o-CD	1.00E+12	0.0	14400.0
7582.	heptanone+h=>h2+ch2co+ch3+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
7583.	heptanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
7584.	heptanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
7585.	heptanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
7586.	heptanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
7587.	heptanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
7588.	c6h11hco=Fc6h11-1+hco	7.25E+16	0.0	82400.0
7589.	c6h11hco+o2=c6h11co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
7590.	c6h11hco+ho2=c6h11co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
7591.	c6h11hco+oh=c6h11co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
7592.	c6h11hco+o=c6h11co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
7593.	c6h11hco+h=c6h11co+h2	5.54E+02	3.5	5167.0
7594.	c6h11hco+ch3=c6h11co+ch4	2.25E+00	4.0	8285.0
7595.	c6h11hco+c2h5=c6h11co+c2h6	1.64E+00	3.6	9141.0
7596.	c6h11hco+hco=c6h11co+ch2o	4.70E+04	2.7	18235.0
7597.	c6h11hco+c2h3=c6h11co+c2h4	8.50E+09	0.0	6000.0
7598.	c6h11co=Fc6h11-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
7599.	Ac8h17+o2=c8h17qjA	9.00E+18	-2.5	0.0
7600.	Bc8h17+o2=c8h17qjB	1.70E+19	-2.5	0.0
7601.	Cc8h17+o2=c8h17qjC	1.80E+19	-2.5	0.0
7602.	Dc8h17+o2=c8h17qjD	1.80E+19	-2.5	0.0
7603.	Ac8h17+ho2=c8h17ojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7604.	Bc8h17+ho2=c8h17ojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7605.	Cc8h17+ho2=c8h17ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7606.	Dc8h17+ho2=c8h17ojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7607.	Ac8h17+ch3o2=c8h17ojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7608.	Bc8h17+ch3o2=c8h17ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7609.	Cc8h17+ch3o2=c8h17ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7610.	Dc8h17+ch3o2=c8h17ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7611.	Ac8h17+c2h5o2=c8h17ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7612.	Bc8h17+c2h5o2=c8h17ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7613.	Cc8h17+c2h5o2=c8h17ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7614.	Dc8h17+c2h5o2=c8h17ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7615.	Ac8h17+nc3h7o2=c8h17ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7616.	Bc8h17+nc3h7o2=c8h17ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7617.	Cc8h17+nc3h7o2=c8h17ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7618.	Dc8h17+nc3h7o2=c8h17ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7619.	Ac8h17+ic3h7o2=c8h17ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7620.	Bc8h17+ic3h7o2=c8h17ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7621.	Cc8h17+ic3h7o2=c8h17ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7622.	Dc8h17+ic3h7o2=c8h17ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7623.	Ac8h17+c8h17qjA=2c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7624.	Bc8h17+c8h17qjA=c8h17ojB+c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7625.	Cc8h17+c8h17qjA=c8h17ojC+c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7626.	Dc8h17+c8h17qjA=c8h17ojD+c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7627.	Ac8h17+c8h17qjB=c8h17ojA+c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7628.	Bc8h17+c8h17qjB=2c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7629.	Cc8h17+c8h17qjB=c8h17ojC+c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7630.	Dc8h17+c8h17qjB=c8h17ojD+c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7631.	Ac8h17+c8h17qjC=c8h17ojA+c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7632.	Bc8h17+c8h17qjC=c8h17ojB+c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7633.	Cc8h17+c8h17qjC=2c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7634.	Dc8h17+c8h17qjC=c8h17ojD+c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7635.	Ac8h17+c8h17qjD=c8h17ojA+c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7636.	Bc8h17+c8h17qjD=c8h17ojB+c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7637.	Cc8h17+c8h17qjD=c8h17ojC+c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7638.	Dc8h17+c8h17qjD=2c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7639.	c8h17ojA=ch2o+Ac7h15	1.15E+19	-1.7	14691.0
7640.	c8h17ojB=ch3hco+Ac6h13	6.40E+18	-1.5	13021.0
7641.	c8h17ojB=ch3+c6h13hco	9.01E+16	-1.0	16533.0
7642.	c8h17ojC=ethco+Ac5h11	6.65E+18	-1.5	12880.0
7643.	c8h17ojC=c2h5+c5h11hco	7.61E+20	-2.1	12641.0
7644.	c8h17ojD=nc3h7+nc4h9hco	4.52E+19	-1.7	13356.0
7645.	c8h17ojD=nc3h7hco+pc4h9	1.94E+20	-1.8	13104.0
7646.	c8h17qA=oh+c8h17ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
7647.	c8h17qB=oh+c8h17ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
7648.	c8h17qC=oh+c8h17ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
7649.	c8h17qD=oh+c8h17ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
7650.	c8h17qjA=c8h16rBqA	5.70E+08	1.0	32500.0
7651.	c8h17qjA=c8h16rCqA	9.90E+07	1.0	25000.0
7652.	c8h17qjA=c8h16rDqA	1.70E+07	1.0	22000.0
7653.	c8h17qjA=c8h16rEqA	2.90E+06	1.0	21000.0
7654.	c8h17qjB=c8h16rAqB	8.65E+08	1.0	35500.0
7655.	c8h17qjB=c8h16rCqB	5.70E+08	1.0	32500.0
7656.	c8h17qjB=c8h16rDqB	9.90E+07	1.0	25000.0
7657.	c8h17qjB=c8h16rEqB	1.70E+07	1.0	22000.0
7658.	c8h17qjB=c8h16rFqB	2.90E+06	1.0	21000.0
7659.	c8h17qjC=c8h16rAqC	1.48E+08	1.0	28000.0
7660.	c8h17qjC=c8h16rBqC	5.70E+08	1.0	32500.0
7661.	c8h17qjC=c8h16rDqC	5.70E+08	1.0	32500.0
7662.	c8h17qjC=c8h16rEqC	9.90E+07	1.0	25000.0
7663.	c8h17qjC=c8h16rFqC	1.70E+07	1.0	22000.0
7664.	c8h17qjC=c8h16rGqC	2.90E+06	1.0	21000.0
7665.	c8h17qjD=c8h16rAqD	2.53E+07	1.0	25000.0
7666.	c8h17qjD=c8h16rBqD	9.90E+07	1.0	25000.0
7667.	c8h17qjD=c8h16rCqD	5.70E+08	1.0	32500.0
7668.	c8h17qjD=c8h16rEqD	5.70E+08	1.0	32500.0
7669.	c8h17qjD=c8h16rFqD	9.90E+07	1.0	25000.0
7670.	c8h17qjD=c8h16rGqD	1.70E+07	1.0	22000.0
7671.	c8h17qjD=c8h16rHqD	2.90E+06	1.0	21000.0
7672.	c8h17qjA+ho2=c8h17qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7673.	c8h17qjB+ho2=c8h17qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7674.	c8h17qjC+ho2=c8h17qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7675.	c8h17qjD+ho2=c8h17qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7676.	c8h17qjA+h2o2=c8h17qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7677.	c8h17qjB+h2o2=c8h17qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7678.	c8h17qjC+h2o2=c8h17qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7679.	c8h17qjD+h2o2=c8h17qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7680.	c8h17qjA+ho2=c8h17ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7681.	c8h17qjB+ho2=c8h17ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7682.	c8h17qjC+ho2=c8h17ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7683.	c8h17qjD+ho2=c8h17ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7684.	c8h17qjA+ch3o2=c8h17ojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7685.	c8h17qjB+ch3o2=c8h17ojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7686.	c8h17qjC+ch3o2=c8h17ojC+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7687.	c8h17qjD+ch3o2=c8h17ojD+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7688.	c8h17qjA+c8h17qjA=c8h17ojA+c8h17ojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7689.	c8h17qjA+c8h17qjB=c8h17ojA+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7690.	c8h17qjA+c8h17qjC=c8h17ojA+c8h17ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7691.	c8h17qjA+c8h17qjD=c8h17ojA+c8h17ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7692.	c8h17qjB+c8h17qjB=c8h17ojB+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7693.	c8h17qjB+c8h17qjC=c8h17ojC+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7694.	c8h17qjB+c8h17qjD=c8h17ojD+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7695.	c8h17qjC+c8h17qjC=c8h17ojC+c8h17ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7696.	c8h17qjC+c8h17qjD=c8h17ojC+c8h17ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7697.	c8h17qjD+c8h17qjD=c8h17ojD+c8h17ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7698.	c8h16rBqA+o2=c8h16qjBqA	1.70E+19	-2.5	0.0
7699.	c8h16rCqA+o2=c8h16qjCqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7700.	c8h16rDqA+o2=c8h16qjDqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7701.	c8h16rEqA+o2=c8h16qjEqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7702.	c8h16rAqB+o2=c8h16qjAqB	9.00E+18	-2.5	0.0
7703.	c8h16rCqB+o2=c8h16qjCqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7704.	c8h16rDqB+o2=c8h16qjDqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7705.	c8h16rEqB+o2=c8h16qjEqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7706.	c8h16rFqB+o2=c8h16qjFqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7707.	c8h16rAqC+o2=c8h16qjAqC	9.00E+18	-2.5	0.0
7708.	c8h16rBqC+o2=c8h16qjBqC	1.70E+19	-2.5	0.0
7709.	c8h16rDqC+o2=c8h16qjDqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7710.	c8h16rEqC+o2=c8h16qjEqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7711.	c8h16rFqC+o2=c8h16qjFqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7712.	c8h16rGqC+o2=c8h16qjGqC	1.70E+19	-2.5	0.0
7713.	c8h16rAqD+o2=c8h16qjAqD	9.00E+18	-2.5	0.0
7714.	c8h16rBqD+o2=c8h16qjBqD	1.70E+19	-2.5	0.0
7715.	c8h16rCqD+o2=c8h16qjCqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7716.	c8h16rEqD+o2=c8h16qjEqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7717.	c8h16rFqD+o2=c8h16qjFqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7718.	c8h16rGqD+o2=c8h16qjGqD	1.70E+19	-2.5	0.0
7719.	c8h16rHqD+o2=c8h16qjHqD	9.00E+18	-2.5	0.0
7720.	c8h16rAqC=>oh+c2h4+c5h11hco	5.00E+13	0.0	25500.0
7721.	c8h16rCqA=>oh+ch2o+c7h14-1	5.00E+13	0.0	25500.0
7722.	c8h16rBqD=>oh+c3h6+nc4h9hco	5.00E+13	0.0	25500.0
7723.	c8h16rDqB=>oh+c6h12-1+ch3hco	5.00E+13	0.0	25500.0
7724.	c8h16rFqD=>oh+c4h8+nc3h7hco	5.00E+13	0.0	25500.0
7725.	c8h16rEqC=>oh+ethco+c5h10	5.00E+13	0.0	25500.0
7726.	c8h16rBqA=oh+c8h16o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
7727.	c8h16rCqA=oh+c8h16o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
7728.	c8h16rDqA=oh+c8h16o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
7729.	c8h16rEqA=oh+c8h16o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
7730.	c8h16rAqB=oh+c8h16o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
7731.	c8h16rCqB=oh+c8h16o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
7732.	c8h16rDqB=oh+c8h16o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
7733.	c8h16rEqB=oh+c8h16o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
7734.	c8h16rFqB=oh+c8h16o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
7735.	c8h16rBqC=oh+c8h16o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
7736.	c8h16rAqC=oh+c8h16o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
7737.	c8h16rDqC=oh+c8h16o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
7738.	c8h16rEqC=oh+c8h16o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
7739.	c8h16rFqC=oh+c8h16o-CF	3.63E+10	0.0	13000.0
7740.	c8h16rGqC=oh+c8h16o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
7741.	c8h16rCqD=oh+c8h16o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
7742.	c8h16rBqD=oh+c8h16o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
7743.	c8h16rAqD=oh+c8h16o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
7744.	c8h16rEqD=oh+c8h16o-DE	1.38E+12	0.0	15900.0
7745.	c8h16rFqD=oh+c8h16o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
7746.	c8h16rGqD=oh+c8h16o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
7747.	c8h16rHqD=oh+c8h16o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
7748.	ho2+c8h16-1=c8h16rAqB	1.50E+11	0.0	7800.0
7749.	ho2+c8h16-1=c8h16rBqA	1.50E+11	0.0	7800.0
7750.	ho2+c8h16-2=c8h16rBqC	1.50E+11	0.0	7800.0
7751.	ho2+c8h16-2=c8h16rCqB	1.50E+11	0.0	7800.0
7752.	ho2+c8h16-3=c8h16rCqD	1.50E+11	0.0	7800.0
7753.	ho2+c8h16-3=c8h16rDqC	1.50E+11	0.0	7800.0
7754.	ho2+c8h16-4=c8h16rEqD	1.50E+11	0.0	7800.0
7755.	c8h16qjBqA=oh+c8h15oAqB	3.35E+09	1.0	30500.0
7756.	c8h16qjCqA=oh+c8h15oAqC	5.75E+08	1.0	23000.0
7757.	c8h16qjDqA=oh+c8h15oAqD	9.89E+07	1.0	20000.0
7758.	c8h16qjEqA=oh+c8h15oAqE	1.70E+07	1.0	19000.0
7759.	c8h16qjAqB=oh+c8h15oBqA	1.68E+09	1.0	27500.0
7760.	c8h16qjCqB=oh+c8h15oBqC	1.68E+09	1.0	27500.0
7761.	c8h16qjDqB=oh+c8h15oBqD	2.88E+08	1.0	20000.0
7762.	c8h16qjEqB=oh+c8h15oBqE	4.94E+07	1.0	19000.0
7763.	c8h16qjFqB=oh+c8h15oBqF	8.50E+06	1.0	16000.0
7764.	c8h16qjAqC=oh+c8h15oCqA	2.88E+08	1.0	20000.0
7765.	c8h16qjBqC=oh+c8h15oCqB	1.68E+09	1.0	27500.0
7766.	c8h16qjDqC=oh+c8h15oCqD	1.68E+09	1.0	27500.0
7767.	c8h16qjEqC=oh+c8h15oCqE	2.88E+08	1.0	20000.0
7768.	c8h16qjFqC=oh+c8h15oCqF	4.94E+07	1.0	19000.0
7769.	c8h16qjGqC=oh+c8h15oCqG	8.50E+06	1.0	16000.0
7770.	c8h16qjAqD=oh+c8h15oDqA	4.94E+07	1.0	19000.0
7771.	c8h16qjBqD=oh+c8h15oDqB	2.88E+08	1.0	20000.0
7772.	c8h16qjCqD=oh+c8h15oDqC	1.68E+09	1.0	27500.0
7773.	c8h16qjEqD=oh+c8h15oDqE	1.68E+09	1.0	27500.0
7774.	c8h16qjFqD=oh+c8h15oDqF	2.88E+08	1.0	20000.0
7775.	c8h16qjGqD=oh+c8h15oDqG	4.94E+07	1.0	19000.0
7776.	c8h16qjHqD=oh+c8h15oDqH	8.50E+06	1.0	16000.0
7777.	c8h15oAqB=>oh+hco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7778.	c8h15oAqC=>oh+ch2hco+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7779.	c8h15oAqD=>oh+ch2ch2hco+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7780.	c8h15oAqE=>oh+c3h6cho-1+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7781.	c8h15oBqA=>oh+ch2o+c6h13co	1.00E+16	0.0	43000.0
7782.	c8h15oBqC=>oh+ch3co+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7783.	c8h15oBqD=>oh+ch2coch3+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7784.	c8h15oBqE=>oh+ch3coc2h4p+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7785.	c8h15oBqF=>oh+c3h6coch3-1+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
7786.	c8h15oCqA=>oh+ch2o+nc5h11coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
7787.	c8h15oCqB=>oh+ch3hco+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
7788.	c8h15oCqD=>oh+c2h5co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7789.	c8h15oCqE=>oh+c2h5coch2+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7790.	c8h15oCqF=>oh+c2h5coc2h4p+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
7791.	c8h15oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+ch3hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7792.	c8h15oDqA=>oh+ch2o+nc4h9coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
7793.	c8h15oDqB=>oh+ch3hco+nc4h9coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
7794.	c8h15oDqC=>oh+ethco+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
7795.	c8h15oDqE=>oh+nc3h7hco+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
7796.	c8h15oDqF=>oh+nc3h7coch2+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
7797.	c8h15oDqG=>oh+nc3h7coc2h4p+ch3hco	1.00E+16	0.0	43000.0
7798.	c8h15oDqH=>oh+nc3h7coc3h6-1+ch2o	1.00E+16	0.0	43000.0
7799.	c8h16o-AB+h=>h2+acrol+Ac5h11	4.80E+08	1.5	2785.0
7800.	c8h16o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac5h11	2.40E+06	2.0	-1192.0
7801.	c8h16o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac5h11	2.50E+04	2.5	11605.0

7802. c8h16o-AB+h=>h2+ch2co+Ac6h13	2.40E+08	1.5	2005.0
7803. c8h16o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac6h13	1.20E+06	2.0	-1192.0
7804. c8h16o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac6h13	1.00E+04	2.5	9400.0
7805. c8h16o-BC+h=>h2+mvk+pc4h9	2.40E+08	1.5	2005.0
7806. c8h16o-BC+oh=>h2o+mvk+pc4h9	1.20E+06	2.0	-1192.0
7807. c8h16o-BC+ho2=>h2o2+mvk+pc4h9	1.00E+04	2.5	9400.0
7808. c8h16o-BC+h=>h2+c2h5coc2h3+nc3h7	2.40E+08	1.5	2005.0
7809. c8h16o-BC+oh=>h2o+c2h5coc2h3+nc3h7	1.20E+06	2.0	-1192.0
7810. c8h16o-BC+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+nc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
7811. c8h16o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc4h9	2.40E+08	1.5	2005.0
7812. c8h16o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc4h9	1.20E+06	2.0	-1192.0
7813. c8h16o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc4h9	1.00E+04	2.5	9400.0
7814. c8h16o-CD+h=>h2+nc3h7+c2h5coc2h3	2.40E+08	1.5	2005.0
7815. c8h16o-CD+oh=>h2o+nc3h7+c2h5coc2h3	1.20E+06	2.0	-1192.0
7816. c8h16o-CD+ho2=>h2o2+nc3h7+c2h5coc2h3	1.00E+04	2.5	9400.0
7817. c8h16o-CD+h=>h2+c2h5+c2h3coc3h7	4.80E+08	1.5	2005.0
7818. c8h16o-CD+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc3h7	2.40E+06	2.0	-1192.0
7819. c8h16o-CD+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc3h7	2.00E+04	2.5	9400.0
7820. c8h16o-AC+h=>h2+c7h14-1+hco	4.80E+08	1.5	2785.0
7821. c8h16o-AC+oh=>h2o+c7h14-1+hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
7822. c8h16o-AC+ho2=>h2o2+c7h14-1+hco	2.50E+04	2.5	11605.0
7823. c8h16o-AC+h=>h2+c2h4+c5h11co	2.40E+08	1.5	2005.0
7824. c8h16o-AC+oh=>h2o+c2h4+c5h11co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7825. c8h16o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c5h11co	1.00E+04	2.5	9400.0
7826. c8h16o-BD+h=>h2+ch3co+c6h12-1	2.40E+08	1.5	2005.0
7827. c8h16o-BD+oh=>h2o+ch3co+c6h12-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
7828. c8h16o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c6h12-1	1.00E+04	2.5	9400.0
7829. c8h16o-BD+h=>h2+c3h6+nc4h9co	2.40E+08	1.5	2005.0
7830. c8h16o-BD+oh=>h2o+c3h6+nc4h9co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7831. c8h16o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9co	1.00E+04	2.5	9400.0
7832. c8h16o-CE+h=>h2+c5h10+c2h5co	2.40E+08	1.5	2005.0
7833. c8h16o-CE+oh=>h2o+c5h10+c2h5co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7834. c8h16o-CE+ho2=>h2o2+c5h10+c2h5co	1.00E+04	2.5	9400.0
7835. c8h16o-CE+h=>h2+c4h8+c3h7co	2.40E+08	1.5	2005.0
7836. c8h16o-CE+oh=>h2o+c4h8+c3h7co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7837. c8h16o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c3h7co	1.00E+04	2.5	9400.0
7838. c8h16o-AD+h=h2+c6h12-1+ch2hco	4.80E+08	1.5	2785.0
7839. c8h16o-AD+oh=h2o+c6h12-1+ch2hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
7840. c8h16o-AD+ho2=h2o2+c6h12-1+ch2hco	2.50E+04	2.5	11605.0
7841. c8h16o-AD+h=h2+c2h4+nc4h9coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7842. c8h16o-AD+oh=h2o+c2h4+nc4h9coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7843. c8h16o-AD+ho2=h2o2+c2h4+nc4h9coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7844. c8h16o-BE+h=h2+c5h10+ch2coch3	2.40E+08	1.5	2005.0
7845. c8h16o-BE+oh=h2o+c5h10+ch2coch3	1.20E+06	2.0	-1192.0
7846. c8h16o-BE+ho2=h2o2+c5h10+ch2coch3	1.00E+04	2.5	9400.0
7847. c8h16o-BE+h=h2+c3h6+nc3h7coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7848. c8h16o-BE+oh=h2o+c3h6+nc3h7coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7849. c8h16o-BE+ho2=h2o2+c3h6+nc3h7coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7850. c8h16o-CF+h=h2+c4h8+c2h5coch2	4.80E+08	1.5	2005.0
7851. c8h16o-CF+oh=h2o+c4h8+c2h5coch2	2.40E+06	2.0	-1192.0
7852. c8h16o-CF+ho2=h2o2+c4h8+c2h5coch2	2.00E+04	2.5	9400.0
7853. c8h16o-AE+h=>h2+c5h10+ch2ch2hco	4.80E+08	1.5	2785.0
7854. c8h16o-AE+oh=>h2o+c5h10+ch2ch2hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
7855. c8h16o-AE+ho2=>h2o2+c5h10+ch2ch2hco	2.50E+04	2.5	11605.0
7856. c8h16o-AE+h=>h2+c2h4+nc3h7coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7857. c8h16o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc3h7coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7858. c8h16o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc3h7coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7859. c8h16o-BF+h=>h2+c4h8+ch3coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7860. c8h16o-BF+oh=>h2o+c4h8+ch3coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7861. c8h16o-BF+ho2=>h2o2+c4h8+ch3coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7862. c8h16o-BF+h=>h2+c3h6+c2h5coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7863. c8h16o-BF+oh=>h2o+c3h6+c2h5coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7864. c8h16o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7865. octanone+h=>h2+ch2co+c2h5+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
7866. octanone+oh=>h2o+ch2co+c2h5+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
7867. octanone+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
7868. octanone+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
7869. octanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
7870. octanone+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
7871. Ac9h19+o2=c9h19qjA	9.00E+18	-2.5	0.0
7872. Bc9h19+o2=c9h19qjB	1.70E+19	-2.5	0.0
7873. Cc9h19+o2=c9h19qjC	1.80E+19	-2.5	0.0
7874. Dc9h19+o2=c9h19qjD	1.80E+19	-2.5	0.0
7875. Ec9h19+o2=c9h19qjE	1.80E+19	-2.5	0.0
7876. Ac9h19+ho2=c9h19ojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7877. Bc9h19+ho2=c9h19ojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7878. Cc9h19+ho2=c9h19ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7879. Dc9h19+ho2=c9h19ojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7880. Ec9h19+ho2=c9h19ojE+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7881. Ac9h19+ch3o2=c9h19ojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7882. Bc9h19+ch3o2=c9h19ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7883. Cc9h19+ch3o2=c9h19ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7884. Dc9h19+ch3o2=c9h19ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7885. Ec9h19+ch3o2=c9h19ojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7886. Ac9h19+c2h5o2=c9h19ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7887. Bc9h19+c2h5o2=c9h19ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7888. Cc9h19+c2h5o2=c9h19ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7889. Dc9h19+c2h5o2=c9h19ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7890. Ec9h19+c2h5o2=c9h19ojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7891. Ac9h19+nc3h7o2=c9h19ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7892. Bc9h19+nc3h7o2=c9h19ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7893. Cc9h19+nc3h7o2=c9h19ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7894. Dc9h19+nc3h7o2=c9h19ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7895. Ec9h19+nc3h7o2=c9h19ojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7896. Ac9h19+ic3h7o2=c9h19ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7897. Bc9h19+ic3h7o2=c9h19ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7898. Cc9h19+ic3h7o2=c9h19ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7899. Dc9h19+ic3h7o2=c9h19ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7900. Ec9h19+ic3h7o2=c9h19ojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7901. Ac9h19+c9h19qjA=2c9h19ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7902. Bc9h19+c9h19qjA=c9h19ojB+c9h19ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7903. Cc9h19+c9h19qjA=c9h19ojC+c9h19ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7904. Dc9h19+c9h19qjA=c9h19ojD+c9h19ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7905. Ec9h19+c9h19qjA=c9h19ojE+c9h19ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7906. Ac9h19+c9h19qjB=c9h19ojA+c9h19ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7907. Bc9h19+c9h19qjB=2c9h19ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7908. Cc9h19+c9h19qjB=c9h19ojC+c9h19ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7909. Dc9h19+c9h19qjB=c9h19ojD+c9h19ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7910. Ec9h19+c9h19qjB=c9h19ojE+c9h19ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7911. Ac9h19+c9h19qjC=c9h19ojA+c9h19ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7912. Bc9h19+c9h19qjC=c9h19ojB+c9h19ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7913. Cc9h19+c9h19qjC=2c9h19ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7914. Dc9h19+c9h19qjC=c9h19ojD+c9h19ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7915. Ec9h19+c9h19qjC=c9h19ojE+c9h19ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7916. Ac9h19+c9h19qjD=c9h19ojA+c9h19ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7917. Bc9h19+c9h19qjD=c9h19ojB+c9h19ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7918. Cc9h19+c9h19qjD=c9h19ojC+c9h19ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7919. Dc9h19+c9h19qjD=2c9h19ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7920. Ec9h19+c9h19qjD=c9h19ojE+c9h19ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7921. Ac9h19+c9h19qjE=c9h19ojA+c9h19ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7922. Bc9h19+c9h19qjE=c9h19ojB+c9h19ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7923. Cc9h19+c9h19qjE=c9h19ojC+c9h19ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7924. Dc9h19+c9h19qjE=c9h19ojD+c9h19ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7925. Ec9h19+c9h19qjE=2c9h19ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7926. c9h19ojA=ch2o+Ac8h17	1.22E+19	-1.7	14690.0
7927. c9h19ojB=ch3hco+Ac7h15	6.40E+10	0.9	10202.0
7928. c9h19ojB=ch3+c7h15hco	2.08E+10	1.1	14206.0
7929. c9h19ojC=ethco+Ac6h13	1.08E+11	0.9	10094.0
7930. c9h19ojC=c2h5+c6h13hco	1.64E+13	0.3	9297.0
7931. c9h19ojD=nc3h7+c5h11hco	1.51E+14	-0.1	11001.0
7932. c9h19ojD=nc3h7hco+Ac5h11	3.96E+14	-0.1	11590.0
7933. c9h19ojE=pc4h9+nc4h9hco	4.97E+14	-0.1	11232.0
7934. c9h19qA=oh+c9h19ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
7935. c9h19qB=oh+c9h19ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
7936. c9h19qC=oh+c9h19ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
7937. c9h19qD=oh+c9h19ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
7938. c9h19qE=oh+c9h19ojE	1.25E+16	0.0	41600.0
7939. c9h19qjA=c9h18rBqA	5.70E+08	1.0	32500.0
7940. c9h19qjA=c9h18rCqA	9.90E+07	1.0	25000.0
7941. c9h19qjA=c9h18rDqA	1.70E+07	1.0	22000.0
7942. c9h19qjA=c9h18rEqA	2.90E+06	1.0	21000.0
7943. c9h19qjB=c9h18rAqB	8.65E+08	1.0	35500.0
7944. c9h19qjB=c9h18rCqB	5.70E+08	1.0	32500.0
7945. c9h19qjB=c9h18rDqB	9.90E+07	1.0	25000.0
7946. c9h19qjB=c9h18rEqB	1.70E+07	1.0	22000.0
7947. c9h19qjB=c9h18rFqB	2.90E+06	1.0	21000.0
7948. c9h19qjC=c9h18rAqC	1.48E+08	1.0	28000.0
7949. c9h19qjC=c9h18rBqC	5.70E+08	1.0	32500.0
7950. c9h19qjC=c9h18rDqC	5.70E+08	1.0	32500.0
7951. c9h19qjC=c9h18rEqC	9.90E+07	1.0	25000.0
7952. c9h19qjC=c9h18rFqC	1.70E+07	1.0	22000.0
7953. c9h19qjC=c9h18rGqC	2.90E+06	1.0	21000.0
7954. c9h19qjD=c9h18rAqD	2.53E+07	1.0	25000.0
7955. c9h19qjD=c9h18rBqD	9.90E+07	1.0	25000.0
7956. c9h19qjD=c9h18rCqD	5.70E+08	1.0	32500.0
7957. c9h19qjD=c9h18rEqD	5.70E+08	1.0	32500.0
7958. c9h19qjD=c9h18rFqD	9.90E+07	1.0	25000.0
7959. c9h19qjD=c9h18rGqD	1.70E+07	1.0	22000.0
7960. c9h19qjD=c9h18rHqD	2.90E+06	1.0	21000.0
7961. c9h19qjE=c9h18rAqE	8.70E+06	1.0	24000.0
7962. c9h19qjE=c9h18rBqE	3.40E+07	1.0	22000.0
7963. c9h19qjE=c9h18rCqE	1.98E+08	1.0	25000.0
7964. c9h19qjE=c9h18rDqE	1.14E+09	1.0	32500.0
7965. c9h19qjA+ho2=c9h19qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7966. c9h19qjD+ho2=c9h19qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7967. c9h19qjE+ho2=c9h19qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7968. c9h19qjC+ho2=c9h19qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7969. c9h19qjB+ho2=c9h19qE+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7970. c9h19qjA+h2o2=c9h19qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7971. c9h19qjB+h2o2=c9h19qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7972. c9h19qjC+h2o2=c9h19qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7973. c9h19qjD+h2o2=c9h19qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7974. c9h19qjE+h2o2=c9h19qE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7975. c9h19qjA+ho2=c9h19ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7976. c9h19qjB+ho2=c9h19ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7977. c9h19qjC+ho2=c9h19ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7978. c9h19qjD+ho2=c9h19ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7979. c9h19qjE+ho2=c9h19ojE+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7980. c9h19qjA+ch3o2=c9h19ojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7981. c9h19qjB+ch3o2=c9h19ojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7982. c9h19qjC+ch3o2=c9h19ojC+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7983. c9h19qjD+ch3o2=c9h19ojD+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7984. c9h19qjE+ch3o2=c9h19ojE+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7985. c9h19qjA+c9h19qjA=c9h19ojA+c9h19ojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7986. c9h19qjA+c9h19qjB=c9h19ojA+c9h19ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7987. c9h19qjA+c9h19qjC=c9h19ojA+c9h19ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7988. c9h19qjA+c9h19qjD=c9h19ojA+c9h19ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7989. c9h19qjA+c9h19qjE=c9h19ojA+c9h19ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7990. c9h19qjB+c9h19qjB=c9h19ojB+c9h19ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7991. c9h19qjB+c9h19qjC=c9h19ojC+c9h19ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7992. c9h19qjB+c9h19qjD=c9h19ojD+c9h19ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7993. c9h19qjB+c9h19qjE=c9h19ojE+c9h19ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7994. c9h19qjC+c9h19qjC=c9h19ojC+c9h19ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7995. c9h19qjC+c9h19qjD=c9h19ojC+c9h19ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7996. c9h19qjC+c9h19qjE=c9h19ojC+c9h19ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7997. c9h19qjD+c9h19qjD=c9h19ojD+c9h19ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7998. c9h19qjD+c9h19qjE=c9h19ojD+c9h19ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
7999. c9h19qjE+c9h19qjE=c9h19ojE+c9h19ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8000. c9h18rBqA+o2=c9h18qjBqA	1.70E+19	-2.5	0.0
8001. c9h18rCqA+o2=c9h18qjCqA	1.80E+19	-2.5	0.0
8002. c9h18rDqA+o2=c9h18qjDqA	1.80E+19	-2.5	0.0
8003. c9h18rEqA+o2=c9h18qjEqA	1.80E+19	-2.5	0.0
8004. c9h18rAqB+o2=c9h18qjAqB	9.00E+18	-2.5	0.0
8005. c9h18rCqB+o2=c9h18qjCqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8006. c9h18rDqB+o2=c9h18qjDqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8007. c9h18rEqB+o2=c9h18qjEqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8008. c9h18rFqB+o2=c9h18qjFqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8009. c9h18rAqC+o2=c9h18qjAqC	9.00E+18	-2.5	0.0
8010. c9h18rBqC+o2=c9h18qjBqC	1.70E+19	-2.5	0.0
8011. c9h18rDqC+o2=c9h18qjDqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8012. c9h18rEqC+o2=c9h18qjEqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8013. c9h18rFqC+o2=c9h18qjFqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8014. c9h18rGqC+o2=c9h18qjGqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8015. c9h18rAqD+o2=c9h18qjAqD	9.00E+18	-2.5	0.0
8016. c9h18rBqD+o2=c9h18qjBqD	1.70E+19	-2.5	0.0
8017. c9h18rCqD+o2=c9h18qjCqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8018. c9h18rEqD+o2=c9h18qjEqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8019. c9h18rFqD+o2=c9h18qjFqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8020. c9h18rGqD+o2=c9h18qjGqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8021. c9h18rHqD+o2=c9h18qjHqD	1.70E+19	-2.5	0.0
8022. c9h18rAqE+o2=c9h18qjAqE	9.00E+18	-2.5	0.0
8023. c9h18rBqE+o2=c9h18qjBqE	1.70E+19	-2.5	0.0
8024. c9h18rCqE+o2=c9h18qjCqE	1.80E+19	-2.5	0.0
8025. c9h18rDqE+o2=c9h18qjDqE	1.80E+19	-2.5	0.0
8026. c9h18rCqA=oh+ch2o+c8h16-1	1.68E+15	-0.2	29180.0
8027. c9h18rDqB=oh+ch3hco+c7h14-1	3.09E+17	-0.9	29019.0
8028. c9h18rAqC=oh+c2h4+c6h13hco	4.01E+15	-0.4	28648.0
8029. c9h18rEqC=oh+ethco+c6h12-1	1.09E+17	-0.8	28379.0

8030. c9h18rBqD=oh+c3h6+c5h11hco 5.96E+14 -0.1 27833.0
8031. c9h18rFqD=oh+c5h10+nc3h7hco 3.11E+16 -0.6 28187.0
8032. c9h18rCqE=oh+c4h8+nc4h9hco 7.25E+15 -0.4 27996.0
8033. c9h18rBqA=oh+c9h18o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
8034. c9h18rCqA=oh+c9h18o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
8035. c9h18rDqA=oh+c9h18o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
8036. c9h18rEqA=oh+c9h18o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
8037. c9h18rAqB=oh+c9h18o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
8038. c9h18rCqB=oh+c9h18o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
8039. c9h18rDqB=oh+c9h18o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
8040. c9h18rEqB=oh+c9h18o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
8041. c9h18rFqB=oh+c9h18o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
8042. c9h18rAqC=oh+c9h18o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
8043. c9h18rBqC=oh+c9h18o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
8044. c9h18rDqC=oh+c9h18o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
8045. c9h18rEqC=oh+c9h18o-CE 2.04E+11 0.0 19500.0
8046. c9h18rFqC=oh+c9h18o-CF 3.63E+10 0.0 13000.0
8047. c9h18rGqC=oh+c9h18o-CG 1.70E+08 0.0 1950.0
8048. c9h18rAqD=oh+c9h18o-AD 3.60E+09 0.0 7000.0
8049. c9h18rBqD=oh+c9h18o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
8050. c9h18rCqD=oh+c9h18o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
8051. c9h18rEqD=oh+c9h18o-DE 1.38E+12 0.0 15900.0
8052. c9h18rFqD=oh+c9h18o-DF 2.04E+11 0.0 19500.0
8053. c9h18rGqD=oh+c9h18o-CF 3.63E+10 0.0 13000.0
8054. c9h18rHqD=oh+c9h18o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
8055. c9h18rAqE=oh+c9h18o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
8056. c9h18rBqE=oh+c9h18o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
8057. c9h18rCqE=oh+c9h18o-CE 2.04E+11 0.0 19500.0
8058. c9h18rDqE=oh+c9h18o-DE 1.38E+12 0.0 15900.0
8059. ho2+c9h18-1=c9h18rAqB 1.50E+11 0.0 7800.0
8060. ho2+c9h18-1=c9h18rBqA 1.50E+11 0.0 7800.0
8061. ho2+c9h18-2=c9h18rBqC 1.50E+11 0.0 7800.0
8062. ho2+c9h18-2=c9h18rCqB 1.50E+11 0.0 7800.0
8063. ho2+c9h18-3=c9h18rCqD 1.50E+11 0.0 7800.0
8064. ho2+c9h18-3=c9h18rDqC 1.50E+11 0.0 7800.0
8065. ho2+c9h18-4=c9h18rEqD 1.50E+11 0.0 7800.0
8066. ho2+c9h18-4=c9h18rDqE 1.50E+11 0.0 7800.0
8067. c9h18qjBqA=>oh+c9h17oAqB 3.35E+09 1.0 33500.0
8068. c9h18qjCqA=>oh+c9h17oAqC 5.75E+08 1.0 26000.0
8069. c9h18qjDqA=>oh+c9h17oAqD 9.89E+07 1.0 23000.0
8070. c9h18qjEqA=>oh+c9h17oAqE 1.70E+07 1.0 22000.0
8071. c9h18qjAqB=>oh+c9h17oBqA 1.68E+09 1.0 30500.0
8072. c9h18qjCqB=>oh+c9h17oBqC 1.68E+09 1.0 30500.0
8073. c9h18qjDqB=>oh+c9h17oBqD 2.88E+08 1.0 23000.0
8074. c9h18qjEqB=>oh+c9h17oBqE 4.94E+07 1.0 22000.0
8075. c9h18qjFqB=>oh+c9h17oBqF 8.50E+06 1.0 19000.0
8076. c9h18qjAqC=>oh+c9h17oCqA 2.88E+08 1.0 23000.0
8077. c9h18qjBqC=>oh+c9h17oCqB 1.68E+09 1.0 30500.0
8078. c9h18qjDqC=>oh+c9h17oCqD 1.68E+09 1.0 30500.0
8079. c9h18qjEqC=>oh+c9h17oCqE 2.88E+08 1.0 23000.0
8080. c9h18qjFqC=>oh+c9h17oCqF 4.94E+07 1.0 20000.0
8081. c9h18qjGqC=>oh+c9h17oCqG 8.50E+06 1.0 19000.0
8082. c9h18qjAqD=>oh+c9h17oDqA 4.94E+07 1.0 20000.0
8083. c9h18qjBqD=>oh+c9h17oDqB 2.88E+08 1.0 23000.0
8084. c9h18qjCqD=>oh+c9h17oDqC 1.68E+09 1.0 30500.0
8085. c9h18qjEqD=>oh+c9h17oDqE 1.68E+09 1.0 30500.0
8086. c9h18qjFqD=>oh+c9h17oDqF 2.88E+08 1.0 23000.0

8087. c9h18qjGqD=>oh+c9h17oDqG 4.94E+07 1.0 20000.0
8088. c9h18qjHqD=>oh+c9h17oDqH 8.50E+06 1.0 19000.0
8089. c9h18qjAqE=>oh+c9h17oEqA 8.50E+06 1.0 19000.0
8090. c9h18qjBqE=>oh+c9h17oEqB 4.94E+07 1.0 20000.0
8091. c9h18qjCqE=>oh+c9h17oEqC 2.88E+08 1.0 23000.0
8092. c9h18qjDqE=>oh+c9h17oEqD 1.68E+09 1.0 30500.0
8093. c9h17oAqB=oh+hco+c7h15hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8094. c9h17oAqC=oh+ch2hco+c6h13hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8095. c9h17oAqD=oh+ch2ch2hco+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8096. c9h17oAqE=oh+c3h6cho-1+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8097. c9h17oBqA=oh+ch2o+c7h15co 1.00E+16 0.0 43000.0
8098. c9h17oBqC=oh+ch3co+c6h13hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8099. c9h17oBqD=oh+ch2coch3+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8100. c9h17oBqE=oh+ch3coc2h4p+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8101. c9h17oBqF=oh+c3h6coch3-1+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8102. c9h17oCqA=oh+ch2o+nc6h13coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
8103. c9h17oCqB=oh+ch3hco+c6h13co 1.00E+16 0.0 43000.0
8104. c9h17oCqD=oh+c2h5co+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8105. c9h17oCqE=oh+c2h5coch2+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8106. c9h17oCqF=oh+c2h5coc2h4p+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8107. c9h17oCqG=oh+c2h5coc3h6-1+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
8108. c9h17oDqA=oh+ch2o+nc5h11coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
8109. c9h17oDqB=oh+ch3hco+nc5h11coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
8110. c9h17oDqC=oh+ethco+c5h11co 1.00E+16 0.0 43000.0
8111. c9h17oDqE=oh+nc4h9hco+c3h7co 1.00E+16 0.0 43000.0
8112. c9h17oDqF=oh+nc3h7coch2+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8113. c9h17oDqG=oh+nc3h7coc2h4p+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
8114. c9h17oDqH=oh+nc3h7coc3h6-1+ch3hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8115. c9h17oEqA=oh+ch2o+nc4h9coc3h6-1 1.00E+16 0.0 43000.0
8116. c9h17oEqB=oh+ch3hco+nc4h9coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
8117. c9h17oEqC=oh+ethco+nc4h9coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
8118. c9h17oEqD=oh+nc4h9co+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8119. c9h18o-AB+h=>h2+acrol+Ac6h13 4.80E+08 1.5 2785.0
8120. c9h18o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac6h13 2.40E+06 2.0 -1192.0
8121. c9h18o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac6h13 2.50E+04 2.5 11605.0
8122. c9h18o-AB+h=>h2+ch2co+Ac7h15 2.40E+08 1.5 2005.0
8123. c9h18o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac7h15 1.20E+06 2.0 -1192.0
8124. c9h18o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac7h15 1.00E+04 2.5 9400.0
8125. c9h18o-BC+h=>h2+mvk+Ac5h11 2.40E+08 1.5 2005.0
8126. c9h18o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac5h11 1.20E+06 2.0 -1192.0
8127. c9h18o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac5h11 1.00E+04 2.5 9400.0
8128. c9h18o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac6h13 2.40E+08 1.5 2005.0
8129. c9h18o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac6h13 1.20E+06 2.0 -1192.0
8130. c9h18o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac6h13 1.00E+04 2.5 9400.0
8131. c9h18o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+pc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
8132. c9h18o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+pc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
8133. c9h18o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+pc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
8134. c9h18o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc5h11 2.40E+08 1.5 2005.0
8135. c9h18o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc5h11 1.20E+06 2.0 -1192.0
8136. c9h18o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc5h11 1.00E+04 2.5 9400.0
8137. c9h18o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+nc3h7 2.40E+08 1.5 2005.0
8138. c9h18o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+nc3h7 1.20E+06 2.0 -1192.0
8139. c9h18o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+nc3h7 1.00E+04 2.5 9400.0
8140. c9h18o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
8141. c9h18o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
8142. c9h18o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
8143. c9h18o-AC+h=>h2+c8h16-1+hco 4.80E+08 1.5 2785.0

8144. c9h18o-AC+oh=>h2o+c8h16-1+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
8145. c9h18o-AC+ho2=>h2o2+c8h16-1+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
8146. c9h18o-AC+h=>h2+c2h4+c6h13co 2.40E+08 1.5 2005.0
8147. c9h18o-AC+oh=>h2o+c2h4+c6h13co 1.20E+06 2.0 -1192.0
8148. c9h18o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c6h13co 1.00E+04 2.5 9400.0
8149. c9h18o-BD+h=>h2+ch3co+c7h14-1 2.40E+08 1.5 2005.0
8150. c9h18o-BD+oh=>h2o+ch3co+c7h14-1 1.20E+06 2.0 -1192.0
8151. c9h18o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c7h14-1 1.00E+04 2.5 9400.0
8152. c9h18o-BD+h=>h2+c3h6+c5h11co 2.40E+08 1.5 2005.0
8153. c9h18o-BD+oh=>h2o+c3h6+c5h11co 1.20E+06 2.0 -1192.0
8154. c9h18o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c5h11co 1.00E+04 2.5 9400.0
8155. c9h18o-CE+h=>h2+c6h12-1+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
8156. c9h18o-CE+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0
8157. c9h18o-CE+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
8158. c9h18o-CE+h=>h2+c4h8+nc4h9co 2.40E+08 1.5 2005.0
8159. c9h18o-CE+oh=>h2o+c4h8+nc4h9co 1.20E+06 2.0 -1192.0
8160. c9h18o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9co 1.00E+04 2.5 9400.0
8161. c9h18o-DF+h=>h2+c5h10+c3h7co 4.80E+08 1.5 2005.0
8162. c9h18o-DF+oh=>h2o+c5h10+c3h7co 2.40E+06 2.0 -1192.0
8163. c9h18o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+c3h7co 2.00E+04 2.5 9400.0
8164. c9h18o-AD+h=>h2+c2h4+nc5h11coch2 4.80E+08 1.5 2785.0
8165. c9h18o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc5h11coch2 2.40E+06 2.0 -1192.0
8166. c9h18o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11coch2 2.50E+04 2.5 11605.0
8167. c9h18o-AD+h=>h2+c7h14-1+ch2hco 2.40E+08 1.5 2005.0
8168. c9h18o-AD+oh=>h2o+c7h14-1+ch2hco 1.20E+06 2.0 -1192.0
8169. c9h18o-AD+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2hco 1.00E+04 2.5 9400.0
8170. c9h18o-BE+h=>h2+c6h12-1+ch2cooch3 2.40E+08 1.5 2005.0
8171. c9h18o-BE+oh=>h2o+c6h12-1+ch2cooch3 1.20E+06 2.0 -1192.0
8172. c9h18o-BE+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch2cooch3 1.00E+04 2.5 9400.0
8173. c9h18o-BE+h=>h2+c3h6+nc4h9cooch2 2.40E+08 1.5 2005.0
8174. c9h18o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc4h9cooch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
8175. c9h18o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9cooch2 1.00E+04 2.5 9400.0
8176. c9h18o-CF+h=>h2+c5h10+c2h5cooch2 2.40E+08 1.5 2005.0
8177. c9h18o-CF+oh=>h2o+c5h10+c2h5cooch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
8178. c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c5h10+c2h5cooch2 1.00E+04 2.5 9400.0
8179. c9h18o-CF+h=>h2+c4h8+nc3h7cooch2 2.40E+08 1.5 2005.0
8180. c9h18o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc3h7cooch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
8181. c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7cooch2 1.00E+04 2.5 9400.0
8182. c9h18o-AE+h=>h2+c6h12-1+ch2ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
8183. c9h18o-AE+oh=>h2o+c6h12-1+ch2ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
8184. c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch2ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
8185. c9h18o-AE+h=>h2+c2h4+nc4h9coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
8186. c9h18o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc4h9coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
8187. c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc4h9coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
8188. c9h18o-BF+h=>h2+c5h10+ch3coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
8189. c9h18o-BF+oh=>h2o+c5h10+ch3coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
8190. c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c5h10+ch3coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
8191. c9h18o-BF+h=>h2+c3h6+nc3h7coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
8192. c9h18o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc3h7coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
8193. c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc3h7coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
8194. c9h18o-CG+h=>h2+c4h8+c2h5coc2h4p 4.80E+08 1.5 2005.0
8195. c9h18o-CG+oh=>h2o+c4h8+c2h5coc2h4p 2.40E+06 2.0 -1192.0
8196. c9h18o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5coc2h4p 2.00E+04 2.5 9400.0
8197. c9h18-1+ho2=oh+c9h18o-AB 1.00E+12 0.0 14400.0
8198. c9h18-2+ho2=oh+c9h18o-BC 1.00E+12 0.0 14400.0
8199. c9h18-3+ho2=oh+c9h18o-CD 1.00E+12 0.0 14400.0
8200. c9h18-4+ho2=oh+c9h18o-DE 1.00E+12 0.0 14400.0

8201. nonanone+h=>h2+ch2co+ch3+3c2h4 2.70E+07 2.0 5000.0
8202. nonanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+3c2h4 7.80E+06 2.0 -765.0
8203. nonanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+3c2h4 1.20E+12 0.0 15500.0
8204. nonanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+3c2h4 6.00E+11 0.0 9600.0
8205. nonanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+3c2h4 6.00E+11 0.0 9600.0
8206. nonanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+3c2h4 6.00E+11 0.0 11000.0
8207. c8h15hco=Hc8h15-1+hco 7.25E+16 0.0 82400.0
8208. c8h15hco+o2=c8h15co+ho2 2.00E+13 0.5 42200.0
8209. c8h15hco+ho2=c8h15co+h2o2 1.70E+12 0.0 10700.0
8210. c8h15hco+oh=c8h15co+h2o 2.35E+10 0.7 -1113.0
8211. c8h15hco+o=c8h15co+oh 5.85E+12 0.0 1808.0
8212. c8h15hco+h=c8h15co+h2 5.54E+02 3.5 5167.0
8213. c8h15hco+ch3=c8h15co+ch4 2.25E+00 4.0 8285.0
8214. c8h15hco+c2h5=c8h15co+c2h6 1.64E+00 3.6 9141.0
8215. c8h15hco+hco=c8h15co+ch2o 4.70E+04 2.7 18235.0
8216. c8h15hco+c2h3=c8h15co+c2h4 8.50E+09 0.0 6000.0
8217. c8h15co=Hc8h15-1+co 2.00E+13 0.0 28700.0
8218. c8h15co+ho2=>co2+oh+Hc8h15-1 2.00E+13 0.0 0.0
8219. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
8220. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8221. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8222. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8223. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8224. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
8225. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8226. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8227. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8228. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8229. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
8230. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8231. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8232. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8233. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8234. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
8235. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8236. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8237. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8238. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8239. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
8240. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8241. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8242. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8243. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
8244. Ac10h21+o2=c10h21qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
8245. Bc10h21+o2=c10h21qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
8246. Cc10h21+o2=c10h21qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
8247. Dc10h21+o2=c10h21qjD 1.80E+19 -2.5 0.0
8248. Ec10h21+o2=c10h21qjE 1.80E+19 -2.5 0.0
8249. Ac10h21+ho2=c10h21ojA+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8250. Bc10h21+ho2=c10h21ojB+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8251. Cc10h21+ho2=c10h21ojC+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8252. Dc10h21+ho2=c10h21ojD+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8253. Ec10h21+ho2=c10h21ojE+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8254. Ac10h21+ch3o2=c10h21ojA+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8255. Bc10h21+ch3o2=c10h21ojB+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8256. Cc10h21+ch3o2=c10h21ojC+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8257. Dc10h21+ch3o2=c10h21ojD+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0

8258.	Ec10h21+ch3o2=c10h21ojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8259.	Ac10h21+c2h5o2=c10h21ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8260.	Bc10h21+c2h5o2=c10h21ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8261.	Cc10h21+c2h5o2=c10h21ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8262.	Dc10h21+c2h5o2=c10h21ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8263.	Ec10h21+c2h5o2=c10h21ojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8264.	Ac10h21+nc3h7o2=c10h21ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8265.	Bc10h21+nc3h7o2=c10h21ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8266.	Cc10h21+nc3h7o2=c10h21ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8267.	Dc10h21+nc3h7o2=c10h21ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8268.	Ec10h21+nc3h7o2=c10h21ojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8269.	Ac10h21+ic3h7o2=c10h21ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8270.	Bc10h21+ic3h7o2=c10h21ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8271.	Cc10h21+ic3h7o2=c10h21ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8272.	Dc10h21+ic3h7o2=c10h21ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8273.	Ec10h21+ic3h7o2=c10h21ojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
8274.	Ac10h21+c10h21qjA=2c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
8275.	Bc10h21+c10h21qjA=c10h21ojB+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
8276.	Cc10h21+c10h21qjA=c10h21ojC+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
8277.	Dc10h21+c10h21qjA=c10h21ojD+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
8278.	Ec10h21+c10h21qjA=c10h21ojE+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
8279.	Ac10h21+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
8280.	Bc10h21+c10h21qjB=2c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
8281.	Cc10h21+c10h21qjB=c10h21ojC+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
8282.	Dc10h21+c10h21qjB=c10h21ojD+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
8283.	Ec10h21+c10h21qjB=c10h21ojE+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
8284.	Ac10h21+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
8285.	Bc10h21+c10h21qjC=c10h21ojB+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
8286.	Cc10h21+c10h21qjC=2c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
8287.	Dc10h21+c10h21qjC=c10h21ojD+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
8288.	Ec10h21+c10h21qjC=c10h21ojE+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
8289.	Ac10h21+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
8290.	Bc10h21+c10h21qjD=c10h21ojB+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
8291.	Cc10h21+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
8292.	Dc10h21+c10h21qjD=2c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
8293.	Ec10h21+c10h21qjD=c10h21ojE+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
8294.	Ac10h21+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
8295.	Bc10h21+c10h21qjE=c10h21ojB+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
8296.	Cc10h21+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
8297.	Dc10h21+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
8298.	Ec10h21+c10h21qjE=2c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
8299.	c10h21ojA=ch2o+Ac9h19	2.10E+22	-2.6	12941.0
8300.	c10h21ojB=ch3hco+Ac8h17	8.42E+09	1.2	9888.0
8301.	c10h21ojB=ch3+c8h17hco	5.28E+09	1.2	13999.0
8302.	c10h21ojC=ethco+Ac7h15	1.90E+10	1.1	9825.0
8303.	c10h21ojC=c2h5+c7h15hco	3.89E+12	0.5	9071.0
8304.	c10h21ojD=nc3h7+c6h13hco	1.22E+12	0.6	10063.0
8305.	c10h21ojD=nc3h7hco+Ac6h13	5.67E+13	0.2	10812.0
8306.	c10h21ojE=pc4h9+c5h11hco	2.60E+14	-0.1	11248.5
8307.	c10h21ojE=nc4h9hco+Ac5h11	8.89E+11	0.6	10405.0
8308.	c10h21qA=oh+c10h21ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
8309.	c10h21qB=oh+c10h21ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
8310.	c10h21qC=oh+c10h21ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
8311.	c10h21qD=oh+c10h21ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
8312.	c10h21qE=oh+c10h21ojE	1.25E+16	0.0	41600.0
8313.	c10h21qjA=c10h20rBqA	5.70E+08	1.0	32500.0
8314.	c10h21qjA=c10h20rCqA	9.90E+07	1.0	25000.0
8315.	c10h21qjA=c10h20rDqA	1.70E+07	1.0	22000.0
8316.	c10h21qjA=c10h20rEqA	2.90E+06	1.0	21000.0
8317.	c10h21qjB=c10h20rAqB	8.65E+08	1.0	35500.0
8318.	c10h21qjB=c10h20rCqB	5.70E+08	1.0	32500.0
8319.	c10h21qjB=c10h20rDqB	9.90E+07	1.0	25000.0
8320.	c10h21qjB=c10h20rEqB	1.70E+07	1.0	22000.0
8321.	c10h21qjB=c10h20rFqB	2.90E+06	1.0	21000.0
8322.	c10h21qjC=c10h20rAqC	1.48E+08	1.0	28000.0
8323.	c10h21qjC=c10h20rBqC	5.70E+08	1.0	32500.0
8324.	c10h21qjC=c10h20rDqC	5.70E+08	1.0	32500.0
8325.	c10h21qjC=c10h20rEqC	9.90E+07	1.0	25000.0
8326.	c10h21qjC=c10h20rFqC	1.70E+07	1.0	22000.0
8327.	c10h21qjC=c10h20rGqC	2.90E+06	1.0	21000.0
8328.	c10h21qjD=c10h20rAqD	2.53E+07	1.0	25000.0
8329.	c10h21qjD=c10h20rBqD	9.90E+07	1.0	25000.0
8330.	c10h21qjD=c10h20rCqD	5.70E+08	1.0	32500.0
8331.	c10h21qjD=c10h20rEqD	5.70E+08	1.0	32500.0
8332.	c10h21qjD=c10h20rFqD	9.90E+07	1.0	25000.0
8333.	c10h21qjD=c10h20rGqD	1.70E+07	1.0	22000.0
8334.	c10h21qjD=c10h20rHqD	2.90E+06	1.0	21000.0
8335.	c10h21qjE=c10h20rAqE	4.35E+06	1.0	24000.0
8336.	c10h21qjE=c10h20rBqE	1.70E+07	1.0	22000.0
8337.	c10h21qjE=c10h20rCqE	9.90E+07	1.0	25000.0
8338.	c10h21qjE=c10h20rDqE	5.70E+08	1.0	32500.0
8339.	c10h21qjE=c10h20rFqE	5.70E+08	1.0	32500.0
8340.	c10h21qjE=c10h20rGqE	9.90E+07	1.0	25000.0
8341.	c10h21qjE=c10h20rHqE	1.70E+07	1.0	22000.0
8342.	c10h21qjE=c10h20rIqE	2.90E+06	1.0	21000.0
8343.	c10h21qjA+ho2=c10h21qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
8344.	c10h21qjB+ho2=c10h21qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
8345.	c10h21qjC+ho2=c10h21qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
8346.	c10h21qjD+ho2=c10h21qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
8347.	c10h21qjE+ho2=c10h21qE+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
8348.	c10h21qjA+h2o2=c10h21qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
8349.	c10h21qjB+h2o2=c10h21qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
8350.	c10h21qjC+h2o2=c10h21qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
8351.	c10h21qjD+h2o2=c10h21qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
8352.	c10h21qjE+h2o2=c10h21qE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
8353.	c10h21qjA+ho2=c10h21ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8354.	c10h21qjB+ho2=c10h21ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8355.	c10h21qjC+ho2=c10h21ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8356.	c10h21qjD+ho2=c10h21ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8357.	c10h21qjE+ho2=c10h21ojE+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
8358.	c10h21qjA+ch3o2=c10h21ojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8359.	c10h21qjB+ch3o2=c10h21ojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8360.	c10h21qjC+ch3o2=c10h21ojC+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8361.	c10h21qjD+ch3o2=c10h21ojD+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8362.	c10h21qjE+ch3o2=c10h21ojE+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8363.	c10h21qjA+c10h21qjA=c10h21ojA+c10h21ojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8364.	c10h21qjA+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8365.	c10h21qjA+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8366.	c10h21qjA+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8367.	c10h21qjA+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8368.	c10h21qjB+c10h21qjB=c10h21ojB+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8369.	c10h21qjB+c10h21qjC=c10h21ojC+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8370.	c10h21qjB+c10h21qjD=c10h21ojD+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8371.	c10h21qjB+c10h21qjE=c10h21ojE+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8372.	c10h21qjC+c10h21qjC=c10h21ojC+c10h21ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8373.	c10h21qjC+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8374.	c10h21qjC+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8375.	c10h21qjD+c10h21qjD=c10h21ojD+c10h21ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8376.	c10h21qjD+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8377.	c10h21qjE+c10h21qjE=c10h21ojE+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
8378.	c10h20rBqA+o2=c10h20qjBqA	1.70E+19	-2.5	0.0
8379.	c10h20rCqA+o2=c10h20qjCqA	1.80E+19	-2.5	0.0
8380.	c10h20rDqA+o2=c10h20qjDqA	1.80E+19	-2.5	0.0
8381.	c10h20rEqA+o2=c10h20qjEqA	1.80E+19	-2.5	0.0
8382.	c10h20rAqB+o2=c10h20qjAqB	9.00E+18	-2.5	0.0
8383.	c10h20rCqB+o2=c10h20qjCqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8384.	c10h20rDqB+o2=c10h20qjDqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8385.	c10h20rEqB+o2=c10h20qjEqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8386.	c10h20rFqB+o2=c10h20qjFqB	1.80E+19	-2.5	0.0
8387.	c10h20rAqC+o2=c10h20qjAqC	9.00E+18	-2.5	0.0
8388.	c10h20rBqC+o2=c10h20qjBqC	1.70E+19	-2.5	0.0
8389.	c10h20rDqC+o2=c10h20qjDqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8390.	c10h20rEqC+o2=c10h20qjEqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8391.	c10h20rFqC+o2=c10h20qjFqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8392.	c10h20rGqC+o2=c10h20qjGqC	1.80E+19	-2.5	0.0
8393.	c10h20rAqD+o2=c10h20qjAqD	9.00E+18	-2.5	0.0
8394.	c10h20rBqD+o2=c10h20qjBqD	1.70E+19	-2.5	0.0
8395.	c10h20rCqD+o2=c10h20qjCqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8396.	c10h20rEqD+o2=c10h20qjEqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8397.	c10h20rFqD+o2=c10h20qjFqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8398.	c10h20rGqD+o2=c10h20qjGqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8399.	c10h20rHqD+o2=c10h20qjHqD	1.80E+19	-2.5	0.0
8400.	c10h20rAqE+o2=c10h20qjAqE	9.00E+18	-2.5	0.0
8401.	c10h20rBqE+o2=c10h20qjBqE	1.70E+19	-2.5	0.0
8402.	c10h20rCqE+o2=c10h20qjCqE	1.80E+19	-2.5	0.0
8403.	c10h20rDqE+o2=c10h20qjDqE	1.80E+19	-2.5	0.0
8404.	c10h20rFqE+o2=c10h20qjFqE	1.80E+19	-2.5	0.0
8405.	c10h20rGqE+o2=c10h20qjGqE	1.80E+19	-2.5	0.0
8406.	c10h20rHqE+o2=c10h20qjHqE	1.80E+19	-2.5	0.0
8407.	c10h20rIqE+o2=c10h20qjIqE	1.70E+19	-2.5	0.0
8408.	c10h20rCqA=oh+ch2o+c9h18-1	3.67E+12	0.5	28377.0
8409.	c10h20rDqB=oh+ch3hco+c8h16-1	1.27E+18	-1.1	29189.0
8410.	c10h20rAqC=oh+c7h15hco+c2h4	6.38E+15	-0.5	28717.0
8411.	c10h20rEqC=oh+ethco+c7h14-1	5.46E+17	-1.0	28585.0
8412.	c10h20rBqD=oh+c6h13hco+c3h6	1.24E+15	-0.2	27943.0
8413.	c10h20rFqD=oh+nc3h7hco+c6h12-1	1.30E+17	-0.8	28398.0
8414.	c10h20rCqE=oh+c5h11hco+c4h8	8.47E+15	-0.4	28015.0
8415.	c10h20rGqE=oh+nc4h9hco+c5h10	4.49E+16	-0.7	28240.0
8416.	c10h20rBqA=oh+c10h20o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
8417.	c10h20rCqA=oh+c10h20o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
8418.	c10h20rDqA=oh+c10h20o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
8419.	c10h20rEqA=oh+c10h20o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
8420.	c10h20rAqB=oh+c10h20o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
8421.	c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
8422.	c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
8423.	c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
8424.	c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
8425.	c10h20rAqC=oh+c10h20o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
8426.	c10h20rBqC=oh+c10h20o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
8427.	c10h20rDqC=oh+c10h20o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
8428.	c10h20rEqC=oh+c10h20o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
8429.	c10h20rFqC=oh+c10h20o-CF	3.63E+10	0.0	13000.0
8430.	c10h20rGqC=oh+c10h20o-CG	1.70E+08	0.0	1950.0
8431.	c10h20rAqD=oh+c10h20o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
8432.	c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
8433.	c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
8434.	c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE	1.38E+12	0.0	15900.0
8435.	c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF	2.04E+11	0.0	19500.0
8436.	c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG	3.63E+10	0.0	13000.0
8437.	c10h20rHqD=oh+c10h20o-CG	1.70E+08	0.0	1950.0
8438.	c10h20rAqE=oh+c10h20o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
8439.	c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
8440.	c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
8441.	c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE	2.95E+11	0.0	22000.0
8442.	c10h20rFqE=oh+c10h20o-EF	2.95E+11	0.0	22000.0
8443.	c10h20rGqE=oh+c10h20o-DF	2.04E+11	0.0	19500.0
8444.	c10h20rHqE=oh+c10h20o-CF	3.63E+10	0.0	13000.0
8445.	c10h20rIqE=oh+c10h20o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
8446.	ho2+c10h20-1=c10h20rAqB	1.50E+11	0.0	7800.0
8447.	ho2+c10h20-1=c10h20rBqA	1.50E+11	0.0	7800.0
8448.	ho2+c10h20-2=c10h20rBqC	1.50E+11	0.0	7800.0
8449.	ho2+c10h20-2=c10h20rCqB	1.50E+11	0.0	7800.0
8450.	ho2+c10h20-3=c10h20rCqD	1.50E+11	0.0	7800.0
8451.	ho2+c10h20-3=c10h20rDqC	1.50E+11	0.0	7800.0
8452.	ho2+c10h20-4=c10h20rDqE	1.50E+11	0.0	7800.0
8453.	ho2+c10h20-4=c10h20rEqD	1.50E+11	0.0	7800.0
8454.	ho2+c10h20-5=c10h20rFqE	1.50E+11	0.0	7800.0
8455.	c10h20qjBqA=oh+c10h19oAqB	3.35E+09	1.0	33500.0
8456.	c10h20qjCqA=oh+c10h19oAqC	5.75E+08	1.0	26000.0
8457.	c10h20qjDqA=oh+c10h19oAqD	9.89E+07	1.0	23000.0
8458.	c10h20qjEqA=oh+c10h19oAqE	1.70E+07	1.0	22000.0
8459.	c10h20qjAqB=oh+c10h19oBqA	1.68E+09	1.0	30500.0
8460.	c10h20qjCqB=oh+c10h19oBqC	1.68E+09	1.0	30500.0
8461.	c10h20qjDqB=oh+c10h19oBqD	2.88E+08	1.0	23000.0
8462.	c10h20qjEqB=oh+c10h19oBqE	4.94E+07	1.0	20000.0
8463.	c10h20qjFqB=oh+c10h19oBqF	8.50E+06	1.0	19000.0
8464.	c10h20qjAqC=oh+c10h19oCqA	2.88E+08	1.0	23000.0
8465.	c10h20qjBqC=oh+c10h19oCqB	1.68E+09	1.0	30500.0
8466.	c10h20qjDqC=oh+c10h19oCqD	1.68E+09	1.0	30500.0
8467.	c10h20qjEqC=oh+c10h19oCqE	2.88E+08	1.0	23000.0
8468.	c10h20qjFqC=oh+c10h19oCqF	4.94E+07	1.0	20000.0
8469.	c10h20qjGqC=oh+c10h19oCqG	8.50E+06	1.0	19000.0
8470.	c10h20qjAqD=oh+c10h19oDqA	4.94E+07	1.0	20000.0
8471.	c10h20qjBqD=oh+c10h19oDqB	2.88E+08	1.0	23000.0
8472.	c10h20qjCqD=oh+c10h19oDqC	1.68E+09	1.0	30500.0
8473.	c10h20qjEqD=oh+c10h19oDqE	1.68E+09	1.0	30500.0
8474.	c10h20qjFqD=oh+c10h19oDqF	2.88E+08	1.0	23000.0
8475.	c10h20qjGqD=oh+c10h19oDqG	4.94E+07	1.0	20000.0
8476.	c10h20qjHqD=oh+c10h19oDqH	8.50E+06	1.0	19000.0
8477.	c10h20qjAqE=oh+c10h19oEqA	8.50E+06	1.0	19000.0
8478.	c10h20qjBqE=oh+c10h19oEqB	4.94E+07	1.0	20000.0
8479.	c10h20qjCqE=oh+c10h19oEqC	2.88E+08	1.0	23000.0
8480.	c10h20qjDqE=oh+c10h19oEqD	1.68E+09	1.0	30500.0
8481.	c10h20qjFqE=oh+c10h19oEqF	1.68E+09	1.0	30500.0
8482.	c10h20qjGqE=oh+c10h19oEqG	2.88E+08	1.0	23000.0
8483.	c10h20qjHqE=oh+c10h19oEqH	4.94E+07	1.0	20000.0
8484.	c10h20qjIqE=oh+c10h19oEqI	8.50E+06	1.0	19000.0
8485.	c10h19oAqB=>oh+hco+c8h17hco	1.00E+16	0.0	43000.0

8486.	c10h19oAgC=>oh+ch2hco+c7h15hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8487.	c10h19oAgD=>oh+ch2ch2hco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8488.	c10h19oAgE=>oh+c3h6cho-1+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8489.	c10h19oBqA=>oh+ch2o+c8h17co	1.00E+16	0.0	43000.0
8490.	c10h19oBqC=>oh+ch3co+c7h15hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8491.	c10h19oBqD=>oh+ch2coch3+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8492.	c10h19oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8493.	c10h19oBqF=>oh+c3h6coch3-1+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8494.	c10h19oCqA=>oh+ch2o+nc7h15coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
8495.	c10h19oCqB=>oh+ch3hco+c7h15co	1.00E+16	0.0	43000.0
8496.	c10h19oCqD=>oh+c2h5co+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8497.	c10h19oCqE=>oh+c2h5coch2+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8498.	c10h19oCqF=>oh+c2h5coc2h4p+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8499.	c10h19oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8500.	c10h19oDqA=>oh+ch2o+nc6h13coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
8501.	c10h19oDqB=>oh+ch3hco+nc6h13coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
8502.	c10h19oDqC=>oh+ethco+c6h13co	1.00E+16	0.0	43000.0
8503.	c10h19oDqE=>oh+c3h7co+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8504.	c10h19oDqF=>oh+nc4h9hco+nc3h7coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
8505.	c10h19oDqG=>oh+nc3h7hco+nc3h7coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
8506.	c10h19oDqH=>oh+ethco+nc3h7coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
8507.	c10h19oEqA=>oh+ch2o+nc5h11coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
8508.	c10h19oEqB=>oh+ch3hco+nc5h11coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
8509.	c10h19oEqC=>oh+ethco+nc5h11coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
8510.	c10h19oEqD=>oh+nc3h7hco+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
8511.	c10h19oEqF=>oh+nc4h9co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8512.	c10h19oEqG=>oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
8513.	c10h19oEqH=>oh+ethco+nc4h9coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
8514.	c10h19oEqI=>oh+ch3hco+nc4h9coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
8515.	c10h20o-AB+h=>h2+acrol+Ac7h15	4.80E+08	1.5	2785.0
8516.	c10h20o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac7h15	2.40E+06	2.0	-1192.0
8517.	c10h20o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac7h15	2.50E+04	2.5	11605.0
8518.	c10h20o-AB+h=>h2+ch2co+Ac8h17	2.40E+08	1.5	2005.0
8519.	c10h20o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac8h17	1.20E+06	2.0	-1192.0
8520.	c10h20o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac8h17	1.00E+04	2.5	9400.0
8521.	c10h20o-BC+h=>h2+mvk+Ac6h13	2.40E+08	1.5	2005.0
8522.	c10h20o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac6h13	1.20E+06	2.0	-1192.0
8523.	c10h20o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac6h13	1.00E+04	2.5	9400.0
8524.	c10h20o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac7h15	2.40E+08	1.5	2005.0
8525.	c10h20o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac7h15	1.20E+06	2.0	-1192.0
8526.	c10h20o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac7h15	1.00E+04	2.5	9400.0
8527.	c10h20o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+Ac5h11	2.40E+08	1.5	2005.0
8528.	c10h20o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+Ac5h11	1.20E+06	2.0	-1192.0
8529.	c10h20o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+Ac5h11	1.00E+04	2.5	9400.0
8530.	c10h20o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc6h13	2.40E+08	1.5	2005.0
8531.	c10h20o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc6h13	1.20E+06	2.0	-1192.0
8532.	c10h20o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc6h13	1.00E+04	2.5	9400.0
8533.	c10h20o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+pc4h9	2.40E+08	1.5	2005.0
8534.	c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+pc4h9	1.20E+06	2.0	-1192.0
8535.	c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+pc4h9	1.00E+04	2.5	9400.0
8536.	c10h20o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc5h11	2.40E+08	1.5	2005.0
8537.	c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc5h11	1.20E+06	2.0	-1192.0
8538.	c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc5h11	1.00E+04	2.5	9400.0
8539.	c10h20o-EF+h=>h2+c2h3coc4h9+nc3h7	4.80E+08	1.5	2005.0
8540.	c10h20o-EF+oh=>h2o+c2h3coc4h9+nc3h7	2.40E+06	2.0	-1192.0
8541.	c10h20o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc4h9+nc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
8542.	c10h20o-AC+h=>h2+c9h18-1+hco	4.80E+08	1.5	2785.0
8543.	c10h20o-AC+oh=>h2o+c9h18-1+hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
8544.	c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c9h18-1+hco	2.50E+04	2.5	11605.0
8545.	c10h20o-AC+h=>h2+c2h4+c7h15co	2.40E+08	1.5	2005.0
8546.	c10h20o-AC+oh=>h2o+c2h4+c7h15co	1.20E+06	2.0	-1192.0
8547.	c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c7h15co	1.00E+04	2.5	9400.0
8548.	c10h20o-BD+h=>h2+ch3co+c8h16-1	2.40E+08	1.5	2005.0
8549.	c10h20o-BD+oh=>h2o+ch3co+c8h16-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
8550.	c10h20o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c8h16-1	1.00E+04	2.5	9400.0
8551.	c10h20o-BD+h=>h2+c3h6+c6h13co	2.40E+08	1.5	2005.0
8552.	c10h20o-BD+oh=>h2o+c3h6+c6h13co	1.20E+06	2.0	-1192.0
8553.	c10h20o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c6h13co	1.00E+04	2.5	9400.0
8554.	c10h20o-CE+h=>h2+c7h14-1+c2h5co	2.40E+08	1.5	2005.0
8555.	c10h20o-CE+oh=>h2o+c7h14-1+c2h5co	1.20E+06	2.0	-1192.0
8556.	c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2h5co	1.00E+04	2.5	9400.0
8557.	c10h20o-CE+h=>h2+c4h8+c5h11co	2.40E+08	1.5	2005.0
8558.	c10h20o-CE+oh=>h2o+c4h8+c5h11co	1.20E+06	2.0	-1192.0
8559.	c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c5h11co	1.00E+04	2.5	9400.0
8560.	c10h20o-DF+h=>h2+c6h12-1+c3h7co	2.40E+08	1.5	2005.0
8561.	c10h20o-DF+oh=>h2o+c6h12-1+c3h7co	1.20E+06	2.0	-1192.0
8562.	c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c3h7co	1.00E+04	2.5	9400.0
8563.	c10h20o-DF+h=>h2+c5h10+nc4h9co	2.40E+08	1.5	2005.0
8564.	c10h20o-DF+oh=>h2o+c5h10+nc4h9co	1.20E+06	2.0	-1192.0
8565.	c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+nc4h9co	1.00E+04	2.5	9400.0
8566.	c10h20o-AD+h=>h2+c2h4+nc6h13coch2	4.80E+08	1.5	2785.0
8567.	c10h20o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc6h13coch2	2.40E+06	2.0	-1192.0
8568.	c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc6h13coch2	2.50E+04	2.5	11605.0
8569.	c10h20o-AD+h=>h2+c8h16-1+ch2hco	2.40E+08	1.5	2005.0
8570.	c10h20o-AD+oh=>h2o+c8h16-1+ch2hco	1.20E+06	2.0	-1192.0
8571.	c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c8h16-1+ch2hco	1.00E+04	2.5	9400.0
8572.	c10h20o-BE+h=>h2+c7h14-1+ch2coch3	2.40E+08	1.5	2005.0
8573.	c10h20o-BE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2coch3	1.20E+06	2.0	-1192.0
8574.	c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2coch3	1.00E+04	2.5	9400.0
8575.	c10h20o-BE+h=>h2+c3h6+nc5h11coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
8576.	c10h20o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc5h11coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
8577.	c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc5h11coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
8578.	c10h20o-CF+h=>h2+c6h12-1+c2h5coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
8579.	c10h20o-CF+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
8580.	c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
8581.	c10h20o-CF+h=>h2+c4h8+nc4h9coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
8582.	c10h20o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc4h9coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
8583.	c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
8584.	c10h20o-DG+h=>h2+c5h10+nc3h7coch2	4.80E+08	1.5	2005.0
8585.	c10h20o-DG+oh=>h2o+c5h10+nc3h7coch2	2.40E+06	2.0	-1192.0
8586.	c10h20o-DG+ho2=>h2o2+c5h10+nc3h7coch2	4.00E+12	0.0	13260.0
8587.	c10h20o-AE+h=>h2+c7h14-1+ch2ch2hco	4.80E+08	1.5	2785.0
8588.	c10h20o-AE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2ch2hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
8589.	c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2ch2hco	2.50E+04	2.5	11605.0
8590.	c10h20o-AE+h=>h2+c2h4+nc5h11coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
8591.	c10h20o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc5h11coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
8592.	c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
8593.	c10h20o-BF+h=>h2+Fc10h19oB	2.40E+08	1.5	2005.0
8594.	c10h20o-BF+oh=>h2o+Fc10h19oB	1.20E+06	2.0	-1192.0
8595.	c10h20o-BF+ho2=>h2o2+Fc10h19oB	1.00E+04	2.5	9400.0
8596.	c10h20o-BF+h=>h2+c3h6+nc4h9coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
8597.	c10h20o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc4h9coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
8598.	c10h20o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
8599.	c10h20o-CG+h=>h2+Gc10h19oC	2.40E+08	1.5	2005.0
8600.	c10h20o-CG+oh=>h2o+Gc10h19oC	1.20E+06	2.0	-1192.0
8601.	c10h20o-CG+ho2=>h2o2+Gc10h19oC	1.00E+04	2.5	9400.0
8602.	c10h20o-CG+h=>h2+c4h8+nc3h7coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
8603.	c10h20o-CG+oh=>h2o+c4h8+nc3h7coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
8604.	c10h20o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
8605.	ch3coc2h4p+c6h12-1=Fc10h19oB	1.32E+04	2.5	6130.0
8606.	nc3h7+ch3coc5h9-1=Fc10h19oB	1.32E+04	2.5	6130.0
8607.	c2h5coc2h4p+c5h10=Gc10h19oC	1.32E+04	2.5	6130.0
8608.	c2h5+c2h5coc5h9-1=Gc10h19oC	1.32E+04	2.5	6130.0
8609.	c10h20-1+ho2=oh+c10h20o-AB	1.00E+12	0.0	14400.0
8610.	c10h20-2+ho2=oh+c10h20o-BC	1.00E+12	0.0	14400.0
8611.	c10h20-3+ho2=oh+c10h20o-CD	1.00E+12	0.0	14400.0
8612.	c10h20-4+ho2=oh+c10h20o-DE	1.00E+12	0.0	14400.0
8613.	c10h20-5+ho2=oh+c10h20o-EF	1.00E+12	0.0	14400.0
8614.	c9h19hco+h=h2+c9h19co	4.00E+13	0.0	4200.0
8615.	c9h19hco+oh=h2o+c9h19co	4.20E+12	0.0	500.0
8616.	c9h19hco+ho2=h2o2+c9h19co	1.00E+12	0.0	10000.0
8617.	c9h19hco+ch3=ch4+c9h19co	2.00E-06	5.6	2500.0
8618.	c9h19hco+c2h5=c2h6+c9h19co	1.30E+12	0.0	8500.0
8619.	c9h19hco+o2=ho2+c9h19co	1.00E+13	0.0	40700.0
8620.	c9h19co+M=co+Ac9h19+M	8.64E+15	0.0	14400.0
8621.	c9h19co+ho2=>co2+oh+Ac9h19	2.00E+13	0.0	0.0
8622.	choch2ch2cho+oh=h2o+choch2ch2co	5.38E+10	0.8	-340.0
8623.	choch2ch2cho+h=h2+choch2ch2co	8.00E+13	0.0	4200.0
8624.	choch2ch2cho+o=oh+choch2ch2co	1.00E+13	0.0	1790.0
8625.	choch2ch2cho+ch3=ch4+choch2ch2co	3.40E+12	0.0	8440.0
8626.	choch2ch2cho+ho2=h2o2+choch2ch2co	5.60E+12	0.0	13600.0
8627.	choch2ch2cho+o2=ho2+choch2ch2co	4.00E+13	0.5	42200.0
8628.	choch2ch2co+M=co+ch2ch2hco+M	8.64E+15	0.0	14400.0
8629.	choch2ch2co+ho2=oh+co2+ch2ch2hco	2.00E+13	0.0	0.0
8630.	nc7h15coch2=Ac7h15+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
8631.	nc7h15coch2+o2=nc7h15coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8632.	nc7h15coch2o2+ho2=nc7h15coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8633.	nc7h15coch2o2h=nc7h15coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
8634.	ch2o+c7h15co=nc7h15coch2o	1.50E+11	0.0	11900.0
8635.	nc6h13coch2=Ac6h13+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
8636.	nc6h13coch2+o2=nc6h13coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8637.	nc6h13coch2o2+ho2=nc6h13coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8638.	nc6h13coch2o2h=nc6h13coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
8639.	ch2o+c6h13co=nc6h13coch2o	1.50E+11	0.0	11900.0
8640.	nc5h11coch2=Ac5h11+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
8641.	nc5h11coch2+o2=nc5h11coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8642.	nc5h11coch2o2+ho2=c7h13oBqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8643.	nc4h9coch2=pc4h9+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
8644.	nc4h9coch2+o2=nc4h9coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8645.	nc4h9coch2o2+ho2=c6h11oBqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8646.	c2h5coc3h6-1=c2h5coch2+c2h4	2.00E+13	0.0	27000.0
8647.	c2h5coc3h6-1+o2=c2h5coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
8648.	c2h5coc3h6o2-1+ho2=c6h11oCqF+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8649.	nc3h7coc2h4p=c3h7co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
8650.	nc3h7coc2h4p+o2=nc3h7coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8651.	nc3h7coc2h4o2+ho2=c6h11oCqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8652.	nc4h9coc2h4p=nc4h9co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
8653.	nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8654.	nc4h9coc2h4o2+ho2=c7h13oCqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8655.	nc5h11coc2h4p=c5h11co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
8656.	nc5h11coc2h4p+o2=nc5h11coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8657.	nc5h11coc2h4o2+ho2=nc5h11coc2h4o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8658.	nc5h11coc2h4o2h=nc5h11coc2h4o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
8659.	ch2o+nc5h11coch2=nc5h11coc2h4o	1.50E+11	0.0	11900.0
8660.	nc6h13coc2h4p=c6h13co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
8661.	nc6h13coc2h4p+o2=nc6h13coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
8662.	nc6h13coc2h4o2+ho2=nc6h13coc2h4o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8663.	nc6h13coc2h4o2h=nc6h13coc2h4o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
8664.	ch2o+nc6h13coch2=nc6h13coc2h4o	1.50E+11	0.0	11900.0
8665.	nc3h7coc3h6-1=nc3h7coch2+c2h4	2.00E+13	0.0	27000.0
8666.	nc3h7coc3h6-1+o2=nc3h7coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
8667.	nc3h7coc3h6o2-1+ho2=c7h13oDqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8668.	c2h4+nc4h9coch2=nc4h9coc3h6-1	1.32E+04	2.5	6130.0
8669.	nc4h9coc3h6-1+o2=nc4h9coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
8670.	nc4h9coc3h6o2-1+ho2=nc4h9coc3h6o2h-1+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8671.	nc4h9coc3h6o2h-1=nc4h9coc3h6o-1+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
8672.	ch2o+nc4h9coc2h4p=nc4h9coc3h6o-1	1.50E+11	0.0	11900.0
8673.	c2h4+nc5h11coch2=nc5h11coc3h6-1	1.32E+04	2.5	6130.0
8674.	nc5h11coc3h6-1+o2=nc5h11coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
8675.	nc5h11coc3h6o2-1+ho2=npecoc3h6o2h-1+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
8676.	npecoc3h6o2h-1=nc5h11coc3h6o-1+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
8677.	ch2o+nc5h11coc2h4p=nc5h11coc3h6o-1	1.50E+11	0.0	11900.0
8678.	ch3coc5h9-1+oh=ch2coc5h9-1+h2o	5.10E+11	0.0	1192.0
8679.	ch3coc5h9-1+ho2=ch2coc5h9-1+h2o2	2.38E+04	2.5	14690.0
8680.	ch3coc5h9-1+h=ch2coc5h9-1+h2	9.30E+12	0.0	6357.0
8681.	ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-15+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
8682.	ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-15+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
8683.	ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-15+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
8684.	ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-13+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
8685.	ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
8686.	ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-13+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
8687.	ch2co+Ec5h9-1=ch2coc5h9-1	3.33E+10	0.0	6397.0
8688.	mvk+ac3h5=ch3coc5h8-15	8.80E+03	2.5	6130.0
8689.	c4h6+ch2cooch3=ch3coc5h8-13	1.32E+04	2.5	6130.0
8690.	c2h5coc5h9-1+oh=sc2h4coc5h9-1+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
8691.	c2h5coc5h9-1+ho2=sc2h4coc5h9-1+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
8692.	c2h5coc5h9-1+h=sc2h4coc5h9-1+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
8693.	c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-15+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
8694.	c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-15+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
8695.	c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-15+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
8696.	c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-13+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
8697.	c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
8698.	c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-13+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
8699.	ch3chco+Ec5h9-1=sc2h4coc5h9-1	3.33E+10	0.0	6397.0
8700.	c2h5coc2h3+ac3h5=c2h5coc5h8-15	8.80E+03	2.5	6130.0
8701.	c4h6+c2h5ccoch2=c2h5coc5h8-13	1.32E+04	2.5	6130.0
8702.	c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-3+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
8703.	c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-3+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
8704.	c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-3+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
8705.	c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-2+h2o	3.16E+07	1.6	-247.0
8706.	c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-2+h2o2	5.60E+12	0.0	17700.0
8707.	c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-2+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
8708.	divinket+ch3=c2h3coc3h6-3	1.32E+04	2.5	6130.0
8709.	c3h6+c2h3co=c2h3coc3h6-2	1.00E+11	0.0	7800.0
8710.	c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-4+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
8711.	c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-4+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
8712.	c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-4+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
8713.	c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-3+h2o	3.16E+07	1.6	-247.0

8714. c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-3+h2o2 5.60E+12 0.0 17700.0
8715. c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-3+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
8716. divinket+c2h5=c2h3coc4h8-4 1.32E+04 2.5 6130.0
8717. c4h8+c2h3co=c2h3coc4h8-3 1.00E+11 0.0 7800.0
8718. c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-5+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
8719. c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-5+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
8720. c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-5+h2 4.46E+06 2.0 3200.0
8721. c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-4+h2o 3.16E+07 1.6 -247.0
8722. c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-4+h2o2 5.60E+12 0.0 17700.0
8723. c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-4+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
8724. divinket+nc3h7=c2h3coc5h10-5 1.32E+04 2.5 6130.0
8725. c5h10+c2h3co=c2h3coc5h10-4 1.00E+11 0.0 7800.0
8726. c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-6+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
8727. c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-6+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
8728. c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-6+h2 4.46E+06 2.0 3200.0
8729. c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-5+h2o 3.16E+07 1.6 -247.0
8730. c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-5+h2o2 5.60E+12 0.0 17700.0
8731. c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-5+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
8732. divinket+pc4h9=c2h3coc6h12-6 1.32E+04 2.5 6130.0
8733. c6h12-1+c2h3co=c2h3coc6h12-5 1.00E+11 0.0 7800.0
8734. hoco+m=co2+h+m 1.49E+14 0.1 36463.0
8735. c10h21qA+phch2=c10h21qjA+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
8736. c10h21qB+phch2=c10h21qjB+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
8737. c10h21qC+phch2=c10h21qjC+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
8738. c10h21qD+phch2=c10h21qjD+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
8739. c10h21qE+phch2=c10h21qjE+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
8740. c6e5oAo4+oh=c6e5oyAo4+h2o 2.30E+10 0.7 -1100.0
8741. c6e5oAo4+h=c6e5oyAo4+h2 4.10E+09 1.2 2405.0
8742. c6e5oAo4+ho2=c6e5oyAo4+h2o2 3.00E+12 0.0 12000.0
8743. c6e5oAo4+ch3=c6e5oyAo4+ch4 7.60E+00 3.4 3740.0
8744. c6e5oAo4+o2=c6e5oyAo4+ho2 3.00E+13 0.0 39200.0
8745. c6e5oyAo4=c2h3coc2h4+co 2.00E+13 0.0 28700.0
8746. c6e5oyAo4+ho2=>c2h3coc2h4+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8747. MeEc8oDoIrA=pchoEojI 1.00E+08 0.9 5900.0
8748. c2h4+MeCc6oBoGrA=MeEc8oDoIrA 3.30E+11 0.0 7200.0
8749. ch2co+Bc5oA=MeCc6oBoGrA 2.11E+11 0.0 7350.0
8750. decalin=>2Dc5h9-1 2.00E+16 0.0 83000.0
8751. decalin=>cyc6h10+2c2h4 2.00E+16 0.0 81000.0
8752. decalin=>h2+.33333tetralin+.66667decalin 2.00E+13 0.0 71000.0
8753. ho2+decalin=>h2o2+rdecalin 1.60E+13 0.0 15862.0
8754. o2+decalin=>ho2+rdecalin 5.00E+14 0.0 44696.9
8755. o2+rdecalin 1.00E+11 0.0 9000.0
=>ho2+.33333tetralin+.66667decalin
8756. decalin=>odecal 6.00E+16 0.0 78500.0
8757. odecal=>2c2h4+c6h6+2h2 9.10E+15 0.0 72000.0
8758. odecal=>c3h6+toluen+2h2 1.69E+16 0.0 72000.0
8759. rodeca=>ac3h5+c2h4+c5h8-13 9.00E+12 0.0 30000.0
8760. rodeca=>ch3+c4h6+c5h8-13 6.00E+12 0.0 30000.0
8761. rodeca=>h+dcyc5 1.00E+14 0.0 37000.0
8762. o2+rodeca=>ho2+dcyc5 1.00E+11 0.0 4000.0
8763. rdecalin=>ac3h5+c2h4+c5h8-13 7.50E+12 0.0 30000.0
8764. rdecalin=>Dc4h7-1+cyc6h10 4.00E+12 0.0 30000.0
8765. rdecalin=>pc4h9+chd13 3.00E+12 0.0 30000.0
8766. rdecalin=>ch3+c4h6+c5h8-13 6.00E+12 0.0 32000.0
8767. rdecalin=>h+.666667decalin+.333333tetralin 5.00E+13 0.0 39000.0
8768. rdecalin=>nc3h7+.66666667toluen+.33333333mch4.00E+12 0.0 30000.0
8769. rdecalin=>ac3h5+.66666667mch+.33333333toluen2.00E+12 0.0 30000.0

8770. rdecalin=>ch3+.6mch+.4indene+.6c2h4 1.00E+12 0.0 30000.0
8771. rdecalin=>c2h5+.5phc2h5+.5xylene+h2 2.00E+12 0.0 30000.0
8772. rdecalin=>cyc6h11+c4h6 1.50E+12 0.0 30000.0
8773. rdecalin=>nc3h7+c2h4+CPD 2.50E+12 0.0 30000.0
8774. rdecalin=>h+dcyc5 1.00E+14 0.0 37000.0
8775. o2+rdecalin=>ho2+dcyc5 1.00E+11 0.0 5000.0
8776. dcyc5=>cyc5h7+CPD+h2+h 1.00E+16 0.0 72000.0
8777. rdecalin+o2=>rdecoo 1.00E+12 0.0 0.0
8778. rdecoo=>rdecalin+o2 3.00E+13 0.0 29000.0
8779. rdecoo=>qdecooh 1.00E+12 0.0 26500.0
8780. qdecooh=>rdecoo 3.00E+11 0.0 13500.0
8781. qdecooh+o2=>zdeca 1.00E+12 0.0 0.0
8782. zdeca=>qdecooh+o2 3.00E+13 0.0 29000.0
8783. zdeca=>oh+khdeca 1.00E+12 0.0 26500.0
8784. khdeca=>oh+cyc6h10+ch2co+ch2hco 1.00E+15 0.0 43000.0
8785. xylene=rxylene+h 9.00E+15 0.0 89200.0
8786. xylene=ch3+c6h4ch3 5.00E+16 0.0 98000.0
8787. h+xylene=toluen+ch3 2.40E+13 0.0 5000.0
8788. o2+rxylene=>phhco+oh+.5c2h4 1.00E+13 0.0 26500.0
8789. o2+rxylene=>c6h4ch3+ch2o+o 2.00E+10 0.0 14500.0
8790. oh+rxylene=>phch2oh+.5c2h4 6.00E+13 0.0 0.0
8791. o+rxylene=>phhco+h+.5c2h4 1.80E+14 0.0 0.0
8792. o+rxylene=>c6h4ch3+ch2o 8.00E+13 0.0 0.0
8793. ho2+rxylene=>phhco+h+oh+.5c2h4 5.00E+12 0.0 3000.0
8794. ho2+rxylene=>c6h4ch3+ch2o+oh 1.00E+13 0.0 0.0
8795. h+c6h4ch3=toluen 3.00E+14 0.0 0.0
8796. c6h4ch3=phch2 1.00E+10 0.0 42000.0
8797. oh+toluen=>c6h4ch3+h2o 1.00E+13 0.0 6200.0
8798. nc4h3+pc3h4=>c6h4ch3 2.40E+10 0.0 0.0
8799. c6h4ch3=>nc4h3+pc3h4 4.50E+13 0.0 72500.0
8800. o2+c6h4ch3=rcresolo+o 2.00E+12 0.0 9500.0
8801. rcresolo=>c6h6+h+co 2.50E+11 0.0 44000.0
8802. h+indene=>c6h5+.5ac3h4+.5pc3h4 2.50E+12 0.0 3000.0
8803. oh+indene=>c6h5+c2h4+co 6.00E+12 0.0 0.0
8804. o+indene=>c6h5+c2h3+co 6.00E+12 0.0 0.0
8805. h+indenyl=indene 1.50E+14 0.0 0.0
8806. o2+indene=>c6h5+co+ch2co+h 8.00E+13 0.0 38000.0
8807. o2+indenyl=>phc2h+co+oh 5.00E+11 0.0 17500.0
8808. oh+indene=>rxylene+co 5.00E+11 0.0 0.0
8809. o+indene=>phhco+c2h2 1.00E+13 0.0 3000.0
8810. o+indenyl=ASTYRYL+co 1.00E+14 0.0 0.0
8811. ho2+indenyl=>c6h5+co+ch2hco 1.00E+13 0.0 0.0
8812. indenyl+h2=>indene+h 1.00E+12 0.0 13000.0
8813. oh+indenyl=>.5styren+.5co+.5ASTYRYL+.5hco 1.00E+13 0.0 0.0
8814. tetralin=>ac3h5+c6h4ch3 1.00E+14 0.0 76500.0
8815. tetralin=>c2h3+styren+h 2.00E+14 0.0 76500.0
8816. tetralin=>c6h5+c2h3+c2h4 1.00E+13 0.0 76500.0
8817. tetralin=>c6h6+c2h2+c2h4 2.50E+12 0.0 70000.0
8818. tetralin=>styren+c2h4 1.50E+13 0.0 70000.0
8819. tetralin=>c10h10+h2 5.00E+13 0.0 70000.0
8820. c10h10=>napht+h2 1.00E+14 0.0 69000.0
8821. c6h5o+c6h5o=>2co+c10h10 2.50E+12 0.0 6000.0
8822. h+c10h10=>rtetralin 1.00E+13 0.0 2500.0
8823. oh+c10h10=>c6h4ch3+acrol 5.00E+12 0.0 0.0
8824. oh+c10h10=>ch3hco+ASTYRYL 5.00E+12 0.0 0.0
8825. oh+c10h10=>bzfur+c2h4+h 1.00E+12 0.0 2000.0
8826. rtetralin=>indene+ch3 1.50E+13 0.0 30500.0

8827. rtetralin=>napht+h2+h 2.00E+13 0.0 30500.0
8828. rtetralin=>c10h10+h 3.00E+14 0.0 41000.0
8829. o2+rtetralin=>co+co+c6h5+h2+c2h4 2.50E+11 0.0 1000.0
8830. o2+rtetralin=>ho2+c10h10 5.00E+11 0.0 3000.0
8831. ho2+rtetralin=>oh+co+c2h4+phch2 1.00E+13 0.0 0.0
8832. h+tetralin=>c6h5+2c2h4 8.00E+12 0.0 5000.0
8833. h+tetralin=>c2h5+styren 1.50E+12 0.0 5000.0
8834. h+tetralin=>phch2+c3h6 2.00E+12 0.0 5000.0
8835. h+tetralin=>c2h4+h+styren 1.00E+12 0.0 5000.0
8836. oh+tetralin=>bzfur+c2h4+h2+h 4.00E+12 0.0 3000.0
8837. oh+tetralin=>toluen+hco+c2h4 3.00E+12 0.0 2000.0
8838. o2+rtetralin=>rtetraoo 1.50E+12 0.0 0.0
8839. rtetraoo=>o2+rtetralin 1.00E+13 0.0 32000.0
8840. rtetraoo=>ho2+c10h10 1.00E+11 0.0 21000.0
8841. rtetraoo=>oh+bzfur+c2h4 1.00E+12 0.0 33000.0
8842. rtetraoo=>hco+phhco+c2h4 2.00E+11 0.0 25000.0
8843. o+ASTYRYL=>bzfur+h 1.00E+13 0.0 0.0
8844. oh+ASTYRYL=>bzfur+h2 1.00E+13 0.0 0.0
8845. c2h2+c6h5o=>bzfur+h 3.00E+11 0.0 15000.0
8846. c6h5o+ASTYRYL=>bzfur+c6h6 3.00E+12 0.0 2000.0
8847. phch2+co=>bzfur+h 3.00E+11 0.0 16000.0
8848. oh+phc2h=>bzfur+h 2.00E+12 0.0 10000.0
8849. oh+bzfur=>c6h5+co+ch2o 2.00E+12 0.0 2000.0
8850. h+bzfur=>c6h6+hcco 5.00E+12 0.0 2000.0
8851. ho2+bzfur=>co+c4h4+ch2o+hcco 5.00E+12 0.0 13000.0
8852. h+decalin=>h2+rdecalin 4.81E+07 2.0 3950.6
8853. oh+decalin=>h2o+rdecalin 7.99E+06 2.0 -2259.8
8854. o+decalin=>oh+rdecalin 2.71E+07 2.0 2579.5
8855. hco+decalin=>ch2o+rdecalin 2.53E+06 2.0 12360.4
8856. ch3+decalin=>ch4+rdecalin 7.81E+05 2.0 4871.3
8857. c2h5+decalin=>c2h6+rdecalin 4.60E+05 2.0 7658.1
8858. ac3h5+decalin=>c3h6+rdecalin 4.81E+05 2.0 15253.3
8859. nc3h7+decalin=>c3h8+rdecalin 2.71E+05 2.0 6632.5
8860. ic3h7+decalin=>c3h8+rdecalin 2.71E+05 2.0 8593.6
8861. c2h3+decalin=>c2h4+rdecalin 1.36E+06 2.0 4871.3
8862. c3h3+decalin=>ac3h4+rdecalin 5.40E+05 2.0 14730.6
8863. Cc4h7-1+decalin=>c4h8+rdecalin 6.80E+05 2.0 15253.3
8864. ic4h7+decalin=>ic4h8+rdecalin 6.80E+05 2.0 15253.3
8865. nc4h5+decalin=>c4h6+rdecalin 5.40E+05 2.0 4594.6
8866. nc4h3+decalin=>c4h4+rdecalin 8.17E+05 2.0 5333.4
8867. sc3h5+decalin=>c3h6+rdecalin 5.40E+05 2.0 4594.6
8868. tc3h5+decalin=>c3h6+rdecalin 5.40E+05 2.0 4594.6
8869. Dc4h7-1+decalin=>c4h8+rdecalin 2.71E+05 2.0 6725.6
8870. ch2oh+decalin=>ch3oh+rdecalin 5.66E+05 2.0 10472.6
8871. hcco+decalin=>ch2co+rdecalin 8.56E+05 2.0 5333.4
8872. ch3co+decalin=>ch3hco+rdecalin 2.71E+06 2.0 14065.9
8873. ch3o+decalin=>ch3oh+rdecalin 8.56E+05 2.0 1583.6
8874. ch2hco+decalin=>ch3hco+rdecalin 4.60E+05 2.0 11415.5
8875. o2+odecal=>ho2+rodeca 3.41E+07 2.0 40722.5
8876. h+odecal=>h2+rodeca 4.81E+07 2.0 3950.6
8877. oh+odecal=>h2o+rodeca 7.99E+06 2.0 -2259.8
8878. o+odecal=>oh+rodeca 2.71E+07 2.0 2579.5
8879. ho2+odecal=>h2o2+rodeca 1.08E+06 2.0 11887.7
8880. hco+odecal=>ch2o+rodeca 2.53E+06 2.0 12360.4
8881. ch3+odecal=>ch4+rodeca 7.81E+05 2.0 4871.3
8882. c2h5+odecal=>c2h6+rodeca 4.60E+05 2.0 7658.1
8883. ac3h5+odecal=>c3h6+rodeca 4.81E+05 2.0 15253.3

8884. nc3h7+odecal=>c3h8+rodeca 2.71E+05 2.0 6632.5
8885. ic3h7+odecal=>c3h8+rodeca 2.71E+05 2.0 8593.6
8886. c2h3+odecal=>c2h4+rodeca 1.36E+06 2.0 4871.3
8887. c3h3+odecal=>ac3h4+rodeca 5.40E+05 2.0 14730.6
8888. Cc4h7-1+odecal=>c4h8+rodeca 6.80E+05 2.0 15253.3
8889. ic4h7+odecal=>ic4h8+rodeca 6.80E+05 2.0 15253.3
8890. nc4h5+odecal=>c4h6+rodeca 5.40E+05 2.0 4594.6
8891. nc4h3+odecal=>c4h4+rodeca 8.17E+05 2.0 5333.4
8892. sc3h5+odecal=>c3h6+rodeca 5.40E+05 2.0 4594.6
8893. tc3h5+odecal=>c3h6+rodeca 5.40E+05 2.0 4594.6
8894. Dc4h7-1+odecal=>c4h8+rodeca 2.71E+05 2.0 6725.6
8895. ch2oh+odecal=>ch3oh+rodeca 5.66E+05 2.0 10472.6
8896. hcco+odecal=>ch2co+rodeca 8.56E+05 2.0 5333.4
8897. ch3co+odecal=>ch3hco+rodeca 2.71E+06 2.0 14065.9
8898. ch3o+odecal=>ch3oh+rodeca 8.56E+05 2.0 1583.6
8899. ch2hco+odecal=>ch3hco+rodeca 4.60E+05 2.0 11415.5
8900. o2+dcyc5=>ho2+CPD+h+CPD+h2 1.70E+07 2.0 40722.5
8901. h+dcyc5=>h2+CPD+h+CPD+h2 2.41E+07 2.0 3950.6
8902. oh+dcyc5=>h2o+CPD+h+CPD+h2 3.99E+06 2.0 -2259.8
8903. o+dcyc5=>oh+CPD+h+CPD+h2 1.35E+07 2.0 2579.5
8904. ho2+dcyc5=>h2o2+CPD+h+CPD+h2 5.39E+05 2.0 11887.7
8905. hco+dcyc5=>ch2o+CPD+h+CPD+h2 1.26E+06 2.0 12360.4
8906. ch3+dcyc5=>ch4+CPD+h+CPD+h2 3.90E+05 2.0 4871.3
8907. c2h5+dcyc5=>c2h6+CPD+h+CPD+h2 2.30E+05 2.0 7658.1
8908. ac3h5+dcyc5=>c3h6+CPD+h+CPD+h2 2.41E+05 2.0 15253.3
8909. nc3h7+dcyc5=>c3h8+CPD+h+CPD+h2 1.35E+05 2.0 6632.5
8910. ic3h7+dcyc5=>c3h8+CPD+h+CPD+h2 1.35E+05 2.0 8593.6
8911. c2h3+dcyc5=>c2h4+CPD+h+CPD+h2 6.78E+05 2.0 4871.3
8912. c3h3+dcyc5=>ac3h4+CPD+h+CPD+h2 2.70E+05 2.0 14730.6
8913. Cc4h7-1+dcyc5=>c4h8+CPD+h+CPD+h2 3.40E+05 2.0 15253.3
8914. ic4h7+dcyc5=>ic4h8+CPD+h+CPD+h2 3.40E+05 2.0 15253.3
8915. nc4h5+dcyc5=>c4h6+CPD+h+CPD+h2 2.70E+05 2.0 4594.6
8916. nc4h3+dcyc5=>c4h4+CPD+h+CPD+h2 4.09E+05 2.0 5333.4
8917. sc3h5+dcyc5=>c3h6+CPD+h+CPD+h2 2.70E+05 2.0 4594.6
8918. tc3h5+dcyc5=>c3h6+CPD+h+CPD+h2 2.70E+05 2.0 4594.6
8919. Dc4h7-1+dcyc5=>c4h8+CPD+h+CPD+h2 1.35E+05 2.0 6725.6
8920. ch2oh+dcyc5=>ch3oh+CPD+h+CPD+h2 2.83E+05 2.0 10472.6
8921. hcco+dcyc5=>ch2co+CPD+h+CPD+h2 4.28E+05 2.0 5333.4
8922. ch3co+dcyc5=>ch3hco+CPD+h+CPD+h2 1.35E+06 2.0 14065.9
8923. ch3o+dcyc5=>ch3oh+CPD+h+CPD+h2 4.28E+05 2.0 1583.6
8924. ch2hco+dcyc5=>ch3hco+CPD+h+CPD+h2 2.30E+05 2.0 11415.5
8925. o2+dcyc5=>ho2+cyc5h7+CPD+h2 3.41E+06 2.0 40722.5
8926. h+dcyc5=>h2+cyc5h7+CPD+h2 4.81E+06 2.0 3950.6
8927. oh+dcyc5=>h2o+cyc5h7+CPD+h2 7.99E+05 2.0 -2259.8
8928. o+dcyc5=>oh+cyc5h7+CPD+h2 2.71E+06 2.0 2579.5
8929. ho2+dcyc5=>h2o2+cyc5h7+CPD+h2 1.08E+05 2.0 11887.7
8930. hco+dcyc5=>ch2o+cyc5h7+CPD+h2 2.53E+05 2.0 12360.4
8931. ch3+dcyc5=>ch4+cyc5h7+CPD+h2 7.81E+04 2.0 4871.3
8932. c2h5+dcyc5=>c2h6+cyc5h7+CPD+h2 4.60E+04 2.0 7658.1
8933. ac3h5+dcyc5=>c3h6+cyc5h7+CPD+h2 4.81E+04 2.0 15253.3
8934. nc3h7+dcyc5=>c3h8+cyc5h7+CPD+h2 2.71E+04 2.0 6632.5
8935. ic3h7+dcyc5=>c3h8+cyc5h7+CPD+h2 2.71E+04 2.0 8593.6
8936. c2h3+dcyc5=>c2h4+cyc5h7+CPD+h2 1.36E+05 2.0 4871.3
8937. c3h3+dcyc5=>ac3h4+cyc5h7+CPD+h2 5.40E+04 2.0 14730.6
8938. Cc4h7-1+dcyc5=>c4h8+cyc5h7+CPD+h2 6.80E+04 2.0 15253.3
8939. ic4h7+dcyc5=>ic4h8+cyc5h7+CPD+h2 6.80E+04 2.0 15253.3
8940. nc4h5+dcyc5=>c4h6+cyc5h7+CPD+h2 5.40E+04 2.0 4594.6

8941. nc4h3+dcyc5=>c4h4+cyc5h7+CPD+h2 8.17E+04 2.0 5333.4
8942. sc3h5+dcyc5=>c3h6+cyc5h7+CPD+h2 5.40E+04 2.0 4594.6
8943. tc3h5+dcyc5=>c3h6+cyc5h7+CPD+h2 5.40E+04 2.0 4594.6
8944. Dc4h7-1+dcyc5=>c4h8+cyc5h7+CPD+h2 2.71E+04 2.0 6725.6
8945. ch2oh+dcyc5=>ch3oh+cyc5h7+CPD+h2 5.66E+04 2.0 10472.6
8946. hcco+dcyc5=>ch2co+cyc5h7+CPD+h2 8.56E+04 2.0 5333.4
8947. ch3co+dcyc5=>ch3hco+cyc5h7+CPD+h2 2.71E+05 2.0 14065.9
8948. ch3o+dcyc5=>ch3oh+cyc5h7+CPD+h2 8.56E+04 2.0 1583.6
8949. ch2hco+dcyc5=>ch3hco+cyc5h7+CPD+h2 4.60E+04 2.0 11415.5
8950. o2+dcyc5=>ho2+c6h6+c3h6+ch3 5.11E+06 2.0 40722.5
8951. h+dcyc5=>h2+c6h6+c3h6+ch3 7.22E+06 2.0 3950.6
8952. oh+dcyc5=>h2o+c6h6+c3h6+ch3 1.20E+06 2.0 -2259.8
8953. o+dcyc5=>oh+c6h6+c3h6+ch3 4.06E+06 2.0 2579.5
8954. ho2+dcyc5=>h2o2+c6h6+c3h6+ch3 1.62E+05 2.0 11887.7
8955. hco+dcyc5=>ch2o+c6h6+c3h6+ch3 3.79E+05 2.0 12360.4
8956. ch3+dcyc5=>ch4+c6h6+c3h6+ch3 1.17E+05 2.0 4871.3
8957. c2h5+dcyc5=>c2h6+c6h6+c3h6+ch3 6.90E+04 2.0 7658.1
8958. ac3h5+dcyc5=>c3h6+c6h6+c3h6+ch3 7.22E+04 2.0 15253.3
8959. nc3h7+dcyc5=>c3h8+c6h6+c3h6+ch3 4.06E+04 2.0 6632.5
8960. ic3h7+dcyc5=>c3h8+c6h6+c3h6+ch3 4.06E+04 2.0 8593.6
8961. c2h3+dcyc5=>c2h4+c6h6+c3h6+ch3 2.04E+05 2.0 4871.3
8962. c3h3+dcyc5=>ac3h4+c6h6+c3h6+ch3 8.10E+04 2.0 14730.6
8963. Cc4h7-1+dcyc5=>c4h8+c6h6+c3h6+ch3 1.02E+05 2.0 15253.3
8964. ic4h7+dcyc5=>ic4h8+c6h6+c3h6+ch3 1.02E+05 2.0 15253.3
8965. nc4h5+dcyc5=>c4h6+c6h6+c3h6+ch3 8.10E+04 2.0 4594.6
8966. nc4h3+dcyc5=>c4h4+c6h6+c3h6+ch3 1.23E+05 2.0 5333.4
8967. sc3h5+dcyc5=>c3h6+c6h6+c3h6+ch3 8.10E+04 2.0 4594.6
8968. tc3h5+dcyc5=>c3h6+c6h6+c3h6+ch3 8.10E+04 2.0 4594.6
8969. Dc4h7-1+dcyc5=>c4h8+c6h6+c3h6+ch3 4.06E+04 2.0 6725.6
8970. ch2oh+dcyc5=>ch3oh+c6h6+c3h6+ch3 8.48E+04 2.0 10472.6
8971. hcco+dcyc5=>ch2co+c6h6+c3h6+ch3 1.28E+05 2.0 5333.4
8972. ch3co+dcyc5=>ch3hco+c6h6+c3h6+ch3 4.06E+05 2.0 14065.9
8973. ch3o+dcyc5=>ch3oh+c6h6+c3h6+ch3 1.28E+05 2.0 1583.6
8974. ch2hco+dcyc5=>ch3hco+c6h6+c3h6+ch3 6.90E+04 2.0 11415.5
8975. o2+dcyc5=>ho2+toluen+c3h6+h 1.70E+06 2.0 40722.5
8976. h+dcyc5=>h2+toluen+c3h6+h 2.41E+06 2.0 3950.6
8977. oh+dcyc5=>h2o+toluen+c3h6+h 3.99E+05 2.0 -2259.8
8978. o+dcyc5=>oh+toluen+c3h6+h 1.35E+06 2.0 2579.5
8979. ho2+dcyc5=>h2o2+toluen+c3h6+h 5.39E+04 2.0 11887.7
8980. hco+dcyc5=>ch2o+toluen+c3h6+h 1.26E+05 2.0 12360.4
8981. ch3+dcyc5=>ch4+toluen+c3h6+h 3.90E+04 2.0 4871.3
8982. c2h5+dcyc5=>c2h6+toluen+c3h6+h 2.30E+04 2.0 7658.1
8983. ac3h5+dcyc5=>c3h6+toluen+c3h6+h 2.41E+04 2.0 15253.3
8984. nc3h7+dcyc5=>c3h8+toluen+c3h6+h 1.35E+04 2.0 6632.5
8985. ic3h7+dcyc5=>c3h8+toluen+c3h6+h 1.35E+04 2.0 8593.6
8986. c2h3+dcyc5=>c2h4+toluen+c3h6+h 6.78E+04 2.0 4871.3
8987. c3h3+dcyc5=>ac3h4+toluen+c3h6+h 2.70E+04 2.0 14730.6
8988. Cc4h7-1+dcyc5=>c4h8+toluen+c3h6+h 3.40E+04 2.0 15253.3
8989. ic4h7+dcyc5=>ic4h8+toluen+c3h6+h 3.40E+04 2.0 15253.3
8990. nc4h5+dcyc5=>c4h6+toluen+c3h6+h 2.70E+04 2.0 4594.6
8991. nc4h3+dcyc5=>c4h4+toluen+c3h6+h 4.09E+04 2.0 5333.4
8992. sc3h5+dcyc5=>c3h6+toluen+c3h6+h 2.70E+04 2.0 4594.6
8993. tc3h5+dcyc5=>c3h6+toluen+c3h6+h 2.70E+04 2.0 4594.6
8994. Dc4h7-1+dcyc5=>c4h8+toluen+c3h6+h 1.35E+04 2.0 6725.6
8995. ch2oh+dcyc5=>ch3oh+toluen+c3h6+h 2.83E+04 2.0 10472.6
8996. hcco+dcyc5=>ch2co+toluen+c3h6+h 4.28E+04 2.0 5333.4
8997. ch3co+dcyc5=>ch3hco+toluen+c3h6+h 1.35E+05 2.0 14065.9
8998. ch3o+dcyc5=>ch3oh+toluen+c3h6+h 4.28E+04 2.0 1583.6
8999. ch2hco+dcyc5=>ch3hco+toluen+c3h6+h 2.30E+04 2.0 11415.5
9000. o2+mch=>ho2+mchA 2.38E+07 2.0 40722.5
9001. h+mch=>h2+mchA 3.37E+07 2.0 3950.6
9002. oh+mch=>h2o+mchA 5.59E+06 2.0 -2259.8
9003. o+mch=>oh+mchA 1.90E+07 2.0 2579.5
9004. ho2+mch=>h2o2+mchA 7.54E+05 2.0 11887.7
9005. hco+mch=>ch2o+mchA 1.77E+06 2.0 12360.4
9006. ch3+mch=>ch4+mchA 5.46E+05 2.0 4871.3
9007. c2h5+mch=>c2h6+mchA 3.22E+05 2.0 7658.1
9008. ac3h5+mch=>c3h6+mchA 3.37E+05 2.0 15253.3
9009. nc3h7+mch=>c3h8+mchA 1.90E+05 2.0 6632.5
9010. ic3h7+mch=>c3h8+mchA 1.90E+05 2.0 8593.6
9011. c2h3+mch=>c2h4+mchA 9.50E+05 2.0 4871.3
9012. c3h3+mch=>ac3h4+mchA 3.78E+05 2.0 14730.6
9013. Cc4h7-1+mch=>c4h8+mchA 4.76E+05 2.0 15253.3
9014. ic4h7+mch=>ic4h8+mchA 4.76E+05 2.0 15253.3
9015. nc4h5+mch=>c4h6+mchA 3.78E+05 2.0 4594.6
9016. nc4h3+mch=>c4h4+mchA 5.72E+05 2.0 5333.4
9017. sc3h5+mch=>c3h6+mchA 3.78E+05 2.0 4594.6
9018. tc3h5+mch=>c3h6+mchA 3.78E+05 2.0 4594.6
9019. Dc4h7-1+mch=>c4h8+mchA 1.90E+05 2.0 6725.6
9020. ch2oh+mch=>ch3oh+mchA 3.96E+05 2.0 10472.6
9021. hcco+mch=>ch2co+mchA 5.99E+05 2.0 5333.4
9022. ch3co+mch=>ch3hco+mchA 1.90E+06 2.0 14065.9
9023. ch3o+mch=>ch3oh+mchA 5.99E+05 2.0 1583.6
9024. ch2hco+mch=>ch3hco+mchA 3.22E+05 2.0 11415.5
9025. o2+tetralin=>ho2+rtetralin 2.73E+07 2.0 40722.5
9026. h+tetralin=>h2+rtetralin 3.85E+07 2.0 3950.6
9027. oh+tetralin=>h2o+rtetralin 6.39E+06 2.0 -2259.8
9028. o+tetralin=>oh+rtetralin 2.16E+07 2.0 2579.5
9029. ho2+tetralin=>h2o2+rtetralin 8.62E+05 2.0 11887.7
9030. hco+tetralin=>ch2o+rtetralin 2.02E+06 2.0 12360.4
9031. ch3+tetralin=>ch4+rtetralin 6.24E+05 2.0 4871.3
9032. c2h5+tetralin=>c2h6+rtetralin 3.68E+05 2.0 7658.1
9033. ac3h5+tetralin=>c3h6+rtetralin 3.85E+05 2.0 15253.3
9034. nc3h7+tetralin=>c3h8+rtetralin 2.16E+05 2.0 6632.5
9035. ic3h7+tetralin=>c3h8+rtetralin 2.16E+05 2.0 8593.6
9036. c2h3+tetralin=>c2h4+rtetralin 1.08E+06 2.0 4871.3
9037. c3h3+tetralin=>ac3h4+rtetralin 4.32E+05 2.0 14730.6
9038. Cc4h7-1+tetralin=>c4h8+rtetralin 5.44E+05 2.0 15253.3
9039. ic4h7+tetralin=>ic4h8+rtetralin 5.44E+05 2.0 15253.3
9040. nc4h5+tetralin=>c4h6+rtetralin 4.32E+05 2.0 4594.6
9041. nc4h3+tetralin=>c4h4+rtetralin 6.54E+05 2.0 5333.4
9042. sc3h5+tetralin=>c3h6+rtetralin 4.32E+05 2.0 4594.6
9043. tc3h5+tetralin=>c3h6+rtetralin 4.32E+05 2.0 4594.6
9044. Dc4h7-1+tetralin=>c4h8+rtetralin 2.16E+05 2.0 6725.6
9045. ch2oh+tetralin=>ch3oh+rtetralin 4.52E+05 2.0 10472.6
9046. hcco+tetralin=>ch2co+rtetralin 6.85E+05 2.0 5333.4
9047. ch3co+tetralin=>ch3hco+rtetralin 2.16E+06 2.0 14065.9
9048. ch3o+tetralin=>ch3oh+rtetralin 6.85E+05 2.0 1583.6
9049. ch2hco+tetralin=>ch3hco+rtetralin 3.68E+05 2.0 11415.5
9050. o2+c10h10=>ho2+napht+h 2.38E+07 2.0 40722.5
9051. h+c10h10=>h2+napht+h 3.37E+07 2.0 3950.6
9052. oh+c10h10=>h2o+napht+h 5.59E+06 2.0 -2259.8
9053. o+c10h10=>oh+napht+h 1.90E+07 2.0 2579.5
9054. ho2+c10h10=>h2o2+napht+h 7.54E+05 2.0 11887.7
9055. hco+c10h10=>ch2o+napht+h 1.77E+06 2.0 12360.4
9056. ch3+c10h10=>ch4+napht+h 5.46E+05 2.0 4871.3
9057. c2h5+c10h10=>c2h6+napht+h 3.22E+05 2.0 7658.1
9058. ac3h5+c10h10=>c3h6+napht+h 3.37E+05 2.0 15253.3
9059. nc3h7+c10h10=>c3h8+napht+h 1.90E+05 2.0 6632.5
9060. ic3h7+c10h10=>c3h8+napht+h 1.90E+05 2.0 8593.6
9061. c2h3+c10h10=>c2h4+napht+h 9.50E+05 2.0 4871.3
9062. c3h3+c10h10=>ac3h4+napht+h 3.78E+05 2.0 14730.6
9063. Cc4h7-1+c10h10=>c4h8+napht+h 4.76E+05 2.0 15253.3
9064. ic4h7+c10h10=>ic4h8+napht+h 4.76E+05 2.0 15253.3
9065. nc4h5+c10h10=>c4h6+napht+h 3.78E+05 2.0 4594.6
9066. nc4h3+c10h10=>c4h4+napht+h 5.72E+05 2.0 5333.4
9067. sc3h5+c10h10=>c3h6+napht+h 3.78E+05 2.0 4594.6
9068. tc3h5+c10h10=>c3h6+napht+h 3.78E+05 2.0 4594.6
9069. Dc4h7-1+c10h10=>c4h8+napht+h 1.90E+05 2.0 6725.6
9070. ch2oh+c10h10=>ch3oh+napht+h 3.96E+05 2.0 10472.6
9071. hcco+c10h10=>ch2co+napht+h 5.99E+05 2.0 5333.4
9072. ch3co+c10h10=>ch3hco+napht+h 1.90E+06 2.0 14065.9
9073. ch3o+c10h10=>ch3oh+napht+h 5.99E+05 2.0 1583.6
9074. ch2hco+c10h10=>ch3hco+napht+h 3.22E+05 2.0 11415.5
9075. o2+xylene=ho2+rxylene 3.00E+14 0.0 41400.0
9076. h+xylene=>h2+rxylene 2.00E+14 0.0 7925.0
9077. oh+xylene=>h2o+rxylene 2.40E+06 2.0 -2259.8
9078. o+xylene=>oh+rxylene 8.12E+06 2.0 2579.5
9079. ho2+xylene=>h2o2+rxylene 3.23E+05 2.0 11887.7
9080. hco+xylene=>ch2o+rxylene 7.58E+05 2.0 12360.4
9081. ch3+xylene=>ch4+rxylene 3.50E+12 0.0 8846.0
9082. c2h5+xylene=>c2h6+rxylene 1.38E+05 2.0 7658.1
9083. ac3h5+xylene=>c3h6+rxylene 1.44E+05 2.0 15253.3
9084. nc3h7+xylene=>c3h8+rxylene 8.12E+04 2.0 6632.5
9085. ic3h7+xylene=>c3h8+rxylene 8.12E+04 2.0 8593.6
9086. c2h3+xylene=>c2h4+rxylene 4.07E+05 2.0 4871.3
9087. c3h3+xylene=>ac3h4+rxylene 1.62E+05 2.0 14730.6
9088. Cc4h7-1+xylene=>c4h8+rxylene 2.04E+05 2.0 15253.3
9089. ic4h7+xylene=>ic4h8+rxylene 2.04E+05 2.0 15253.3
9090. nc4h5+xylene=>c4h6+rxylene 1.62E+05 2.0 4594.6
9091. nc4h3+xylene=>c4h4+rxylene 2.45E+05 2.0 5333.4
9092. sc3h5+xylene=>c3h6+rxylene 1.62E+05 2.0 4594.6
9093. tc3h5+xylene=>c3h6+rxylene 1.62E+05 2.0 4594.6
9094. Dc4h7-1+xylene=>c4h8+rxylene 8.12E+04 2.0 6725.6
9095. ch2oh+xylene=>ch3oh+rxylene 1.70E+05 2.0 10472.6
9096. hcco+xylene=>ch2co+rxylene 2.57E+05 2.0 5333.4
9097. ch3co+xylene=>ch3hco+rxylene 8.12E+05 2.0 14065.9
9098. ch3o+xylene=>ch3oh+rxylene 2.57E+05 2.0 1583.6
9099. ch2hco+xylene=>ch3hco+rxylene 1.38E+05 2.0 11415.5
9100. o2+xylene=>ho2+c6h4ch3+.5c2h4 1.36E+07 2.0 51633.9
9101. h+xylene=>h2+c6h4ch3+.5c2h4 1.92E+07 2.0 10480.0
9102. oh+xylene=>h2o+c6h4ch3+.5c2h4 3.20E+06 2.0 2267.4
9103. o+xylene=>oh+c6h4ch3+.5c2h4 1.08E+07 2.0 8782.0
9104. ho2+xylene=>h2o2+c6h4ch3+.5c2h4 4.31E+05 2.0 19844.4
9105. hco+xylene=>ch2o+c6h4ch3+.5c2h4 1.01E+06 2.0 20386.3
9106. ch3+xylene=>ch4+c6h4ch3+.5c2h4 3.12E+05 2.0 11601.8
9107. c2h5+xylene=>c2h6+c6h4ch3+.5c2h4 1.84E+05 2.0 14929.2
9108. ac3h5+xylene=>c3h6+c6h4ch3+.5c2h4 1.92E+05 2.0 23677.6
9109. nc3h7+xylene=>c3h8+c6h4ch3+.5c2h4 1.08E+05 2.0 13714.9
9110. ic3h7+xylene=>c3h8+c6h4ch3+.5c2h4 1.08E+05 2.0 16028.2
9111. c2h3+xylene=>c2h4+c6h4ch3+.5c2h4 5.43E+05 2.0 11601.8
9112. c3h3+xylene=>ac3h4+c6h4ch3+.5c2h4 2.16E+05 2.0 23085.7
9113. Cc4h7-1+xylene=>c4h8+c6h4ch3+.5c2h4 2.72E+05 2.0 23677.6
9114. ic4h7+xylene=>ic4h8+c6h4ch3+.5c2h4 2.72E+05 2.0 23677.6
9115. nc4h5+xylene=>c4h6+c6h4ch3+.5c2h4 2.16E+05 2.0 11266.0
9116. nc4h3+xylene=>c4h4+c6h4ch3+.5c2h4 3.27E+05 2.0 12160.0
9117. sc3h5+xylene=>c3h6+c6h4ch3+.5c2h4 2.16E+05 2.0 11266.0
9118. tc3h5+xylene=>c3h6+c6h4ch3+.5c2h4 2.16E+05 2.0 11266.0
9119. Dc4h7-1+xylene=>c4h8+c6h4ch3+.5c2h4 1.08E+05 2.0 13825.6
9120. ch2oh+xylene=>ch3oh+c6h4ch3+.5c2h4 2.26E+05 2.0 18214.1
9121. hcco+xylene=>ch2co+c6h4ch3+.5c2h4 3.42E+05 2.0 12160.0
9122. ch3co+xylene=>ch3hco+c6h4ch3+.5c2h4 1.08E+06 2.0 22331.5
9123. ch3o+xylene=>ch3oh+c6h4ch3+.5c2h4 3.42E+05 2.0 7522.2
9124. ch2hco+xylene=>ch3hco+c6h4ch3+.5c2h4 1.84E+05 2.0 19301.8
9125. o2+indene=>ho2+indenyl 1.02E+07 2.0 40722.5
9126. h+indene=>h2+indenyl 1.44E+07 2.0 4212.9
9127. oh+indene=>h2o+indenyl 1.50E+14 0.0 4000.0
9128. o+indene=>oh+indenyl 8.12E+06 2.0 2579.5
9129. ho2+indene=>h2o2+indenyl 3.23E+05 2.0 10401.0
9130. hco+indene=>ch2o+indenyl 7.58E+05 2.0 11485.9
9131. ch3+indene=>ch4+indenyl 2.34E+05 2.0 5648.7
9132. c2h5+indene=>c2h6+indenyl 1.38E+05 2.0 7658.1
9133. ac3h5+indene=>c3h6+indenyl 1.44E+05 2.0 14709.2
9134. nc3h7+indene=>c3h8+indenyl 8.12E+04 2.0 6632.5
9135. ic3h7+indene=>c3h8+indenyl 8.12E+04 2.0 8049.4
9136. c2h3+indene=>c2h4+indenyl 4.07E+05 2.0 5707.0
9137. c3h3+indene=>ac3h4+indenyl 1.62E+05 2.0 15566.3
9138. Cc4h7-1+indene=>c4h8+indenyl 2.04E+05 2.0 14709.2
9139. ic4h7+indene=>ic4h8+indenyl 2.04E+05 2.0 14709.2
9140. nc4h5+indene=>c4h6+indenyl 1.62E+05 2.0 5430.3
9141. nc4h3+indene=>c4h4+indenyl 2.45E+05 2.0 6110.8
9142. sc3h5+indene=>c3h6+indenyl 1.62E+05 2.0 5372.0
9143. tc3h5+indene=>c3h6+indenyl 1.62E+05 2.0 4594.6
9144. Dc4h7-1+indene=>c4h8+indenyl 8.12E+04 2.0 6725.6
9145. ch2oh+indene=>ch3oh+indenyl 1.70E+05 2.0 10472.6
9146. hcco+indene=>ch2co+indenyl 2.57E+05 2.0 6169.1
9147. ch3co+indene=>ch3hco+indenyl 8.12E+05 2.0 13191.3
9148. ch3o+indene=>ch3oh+indenyl 2.57E+05 2.0 1389.2
9149. ch2hco+indene=>ch3hco+indenyl 1.38E+05 2.0 11415.5
9150. c7h15-3a+h=c7h16-3 1.00E+14 0.0 0.0
9151. c7h15-3b+h=c7h16-3 1.00E+14 0.0 0.0
9152. c7h15-3c+h=c7h16-3 1.00E+14 0.0 0.0
9153. c7h15-3d+h=c7h16-3 1.00E+14 0.0 0.0
9154. c7h15-3e+h=c7h16-3 1.00E+14 0.0 0.0
9155. c7h15-3f+h=c7h16-3 1.00E+14 0.0 0.0
9156. c7h15-3z+h=c7h16-3 1.00E+14 0.0 0.0
9157. ch3+Ac6h13=c7h16-3 1.00E+13 0.0 0.0
9158. ch3+Cc6h13=c7h16-3 1.00E+13 0.0 0.0
9159. c2h5+Bc5h11=c7h16-3 8.00E+12 0.0 0.0
9160. sc4h9+nc3h7=c7h16-3 8.00E+12 0.0 0.0
9161. ac5h11+c2h5=c7h16-3 8.00E+12 0.0 0.0
9162. 1c6h13+ch3=c7h16-3 1.00E+13 0.0 0.0
9163. c8h17-3a+h=c8h18-3 1.00E+14 0.0 0.0
9164. c8h17-3b+h=c8h18-3 1.00E+14 0.0 0.0
9165. c8h17-3c+h=c8h18-3 1.00E+14 0.0 0.0
9166. c8h17-3d+h=c8h18-3 1.00E+14 0.0 0.0
9167. c8h17-3e+h=c8h18-3 1.00E+14 0.0 0.0
9168. c8h17-3f+h=c8h18-3 1.00E+14 0.0 0.0

9169.	c8h17-3g+h=c8h18-3	1.00E+14	0.0	0.0
9170.	c8h17-3z+h=c8h18-3	1.00E+14	0.0	0.0
9171.	ch3+c7h15-3a=c8h18-3	1.00E+13	0.0	0.0
9172.	ch3+Cc7h15=c8h18-3	1.00E+13	0.0	0.0
9173.	c2h5+Bc6h13=c8h18-3	8.00E+12	0.0	0.0
9174.	sc4h9+pc4h9=c8h18-3	8.00E+12	0.0	0.0
9175.	ac5h11+nc3h7=c8h18-3	8.00E+12	0.0	0.0
9176.	lc6h13+c2h5=c8h18-3	8.00E+12	0.0	0.0
9177.	c7h15-3f+ch3=c8h18-3	1.00E+13	0.0	0.0
9178.	c7h16-3+h=c7h15-3a+h2	6.66E+05	2.5	6756.0
9179.	c7h16-3+h=c7h15-3b+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
9180.	c7h16-3+h=c7h15-3c+h2	6.02E+05	2.4	2583.0
9181.	c7h16-3+h=c7h15-3d+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
9182.	c7h16-3+h=c7h15-3e+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
9183.	c7h16-3+h=c7h15-3f+h2	6.66E+05	2.5	6756.0
9184.	c7h16-3+h=c7h15-3z+h2	6.66E+05	2.5	6756.0
9185.	c7h16-3+o=c7h15-3a+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
9186.	c7h16-3+o=c7h15-3b+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
9187.	c7h16-3+o=c7h15-3c+oh	3.83E+05	2.4	1140.0
9188.	c7h16-3+o=c7h15-3d+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
9189.	c7h16-3+o=c7h15-3e+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
9190.	c7h16-3+o=c7h15-3f+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
9191.	c7h16-3+o=c7h15-3z+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
9192.	c7h16-3+oh=c7h15-3a+h2o	5.28E+09	1.0	1590.0
9193.	c7h16-3+oh=c7h15-3b+h2o	4.70E+07	1.6	-35.0
9194.	c7h16-3+oh=c7h15-3c+h2o	5.73E+10	0.5	63.0
9195.	c7h16-3+oh=c7h15-3d+h2o	4.70E+07	1.6	-35.0
9196.	c7h16-3+oh=c7h15-3e+h2o	4.70E+07	1.6	-35.0
9197.	c7h16-3+oh=c7h15-3f+h2o	5.28E+09	1.0	1590.0
9198.	c7h16-3+oh=c7h15-3z+h2o	5.28E+09	1.0	1590.0
9199.	c7h16-3+ch3=c7h15-3a+ch4	4.52E-01	3.6	7154.0
9200.	c7h16-3+ch3=c7h15-3b+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
9201.	c7h16-3+ch3=c7h15-3c+ch4	6.01E-10	6.4	893.0
9202.	c7h16-3+ch3=c7h15-3d+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
9203.	c7h16-3+ch3=c7h15-3e+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
9204.	c7h16-3+ch3=c7h15-3f+ch4	4.52E-01	3.6	7154.0
9205.	c7h16-3+ch3=c7h15-3z+ch4	4.52E-01	3.6	7154.0
9206.	c7h16-3+ho2=c7h15-3a+h2o2	2.04E+01	3.6	17160.0
9207.	c7h16-3+ho2=c7h15-3b+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
9208.	c7h16-3+ho2=c7h15-3c+h2o2	6.50E+02	3.0	12090.0
9209.	c7h16-3+ho2=c7h15-3d+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
9210.	c7h16-3+ho2=c7h15-3e+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
9211.	c7h16-3+ho2=c7h15-3f+h2o2	2.04E+01	3.6	17160.0
9212.	c7h16-3+ho2=c7h15-3z+h2o2	2.04E+01	3.6	17160.0
9213.	c7h16-3+ch3o=c7h15-3a+ch3oh	2.17E+11	0.0	6548.0
9214.	c7h16-3+ch3o=c7h15-3b+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
9215.	c7h16-3+ch3o=c7h15-3c+ch3oh	2.29E+05	0.0	2873.0
9216.	c7h16-3+ch3o=c7h15-3d+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
9217.	c7h16-3+ch3o=c7h15-3e+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
9218.	c7h16-3+ch3o=c7h15-3f+ch3oh	2.17E+11	0.0	6548.0
9219.	c7h16-3+ch3o=c7h15-3z+ch3oh	2.17E+11	0.0	6548.0
9220.	c7h16-3+o2=c7h15-3a+ho2	3.00E+13	0.0	52800.0
9221.	c7h16-3+o2=c7h15-3b+ho2	2.00E+13	0.0	50150.0
9222.	c7h16-3+o2=c7h15-3c+ho2	7.00E+12	0.0	48000.0
9223.	c7h16-3+o2=c7h15-3d+ho2	2.00E+13	0.0	50150.0
9224.	c7h16-3+o2=c7h15-3e+ho2	2.00E+13	0.0	50150.0
9225.	c7h16-3+o2=c7h15-3f+ho2	3.00E+13	0.0	52800.0
9226.	c7h16-3+o2=c7h15-3z+ho2	3.00E+13	0.0	52800.0
9227.	c7h16-3+c2h5=c7h15-3a+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
9228.	c7h16-3+c2h5=c7h15-3b+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
9229.	c7h16-3+c2h5=c7h15-3c+c2h6	1.00E+11	0.0	7900.0
9230.	c7h16-3+c2h5=c7h15-3d+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
9231.	c7h16-3+c2h5=c7h15-3e+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
9232.	c7h16-3+c2h5=c7h15-3f+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
9233.	c7h16-3+c2h5=c7h15-3z+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
9234.	c7h16-3+c2h3=c7h15-3a+c2h4	5.00E+11	0.0	18000.0
9235.	c7h16-3+c2h3=c7h15-3b+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
9236.	c7h16-3+c2h3=c7h15-3c+c2h4	2.00E+11	0.0	14300.0
9237.	c7h16-3+c2h3=c7h15-3d+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
9238.	c7h16-3+c2h3=c7h15-3e+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
9239.	c7h16-3+c2h3=c7h15-3f+c2h4	5.00E+11	0.0	18000.0
9240.	c7h16-3+c2h3=c7h15-3z+c2h4	5.00E+11	0.0	18000.0
9241.	c7h16-3+ch3o2=c7h15-3a+ch3o2h	6.93E-01	4.0	18280.0
9242.	c7h16-3+ch3o2=c7h15-3b+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
9243.	c7h16-3+ch3o2=c7h15-3c+ch3o2h	2.06E+02	3.1	13190.0
9244.	c7h16-3+ch3o2=c7h15-3d+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
9245.	c7h16-3+ch3o2=c7h15-3e+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
9246.	c7h16-3+ch3o2=c7h15-3f+ch3o2h	6.93E-01	4.0	18280.0
9247.	c7h16-3+ch3o2=c7h15-3z+ch3o2h	6.93E-01	4.0	18280.0
9248.	c7h16-3+c7h15-3a=c7h15-3b+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9249.	c7h16-3+c7h15-3a=c7h15-3c+c7h16-3	2.50E+10	0.0	7900.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9250.	c7h16-3+c7h15-3a=c7h15-3d+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9251.	c7h16-3+c7h15-3a=c7h15-3e+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9252.	c7h16-3+c7h15-3a=c7h15-3f+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9253.	c7h16-3+c7h15-3a=c7h15-3z+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9254.	c7h16-3+c7h15-3b=c7h15-3c+c7h16-3	2.50E+10	0.0	7900.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9255.	c7h16-3+c7h15-3b=c7h15-3d+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9256.	c7h16-3+c7h15-3b=c7h15-3e+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9257.	c7h16-3+c7h15-3b=c7h15-3f+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9258.	c7h16-3+c7h15-3b=c7h15-3z+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9259.	c7h16-3+c7h15-3c=c7h15-3d+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9260.	c7h16-3+c7h15-3c=c7h15-3e+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9261.	c7h16-3+c7h15-3c=c7h15-3f+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9262.	c7h16-3+c7h15-3c=c7h15-3z+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
9263.	c7h16-3+c7h15-3d=c7h15-3e+c7h16-3	5.00E+10	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
9264.	c7h16-3+c7h15-3d=c7h15-3f+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
9265.	c7h16-3+c7h15-3d=c7h15-3z+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
9266.	c7h16-3+c7h15-3e=c7h15-3f+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
9267.	c7h16-3+c7h15-3e=c7h15-3z+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
9268.	c7h16-3+c7h15-3f=c7h15-3z+c7h16-3	7.50E+10	0.0	12300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.50E+10	0.0	12300.0
9269.	c8h18-3+h=c8h17-3a+h2	1.33E+06	2.5	6756.0
9270.	c8h18-3+h=c8h17-3b+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
9271.	c8h18-3+h=c8h17-3c+h2	6.02E+05	2.4	2583.0
9272.	c8h18-3+h=c8h17-3d+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
9273.	c8h18-3+h=c8h17-3e+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
9274.	c8h18-3+h=c8h17-3f+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
9275.	c8h18-3+h=c8h17-3g+h2	1.33E+06	2.5	6756.0
9276.	c8h18-3+h=c8h17-3z+h2	1.33E+06	2.5	6756.0
9277.	c8h18-3+o=c8h17-3a+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
9278.	c8h18-3+o=c8h17-3b+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
9279.	c8h18-3+o=c8h17-3c+oh	3.83E+05	2.4	1140.0
9280.	c8h18-3+o=c8h17-3d+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
9281.	c8h18-3+o=c8h17-3e+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
9282.	c8h18-3+o=c8h17-3f+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
9283.	c8h18-3+o=c8h17-3g+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
9284.	c8h18-3+o=c8h17-3z+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
9285.	c8h18-3+oh=c8h17-3a+h2o	5.28E+09	1.0	1590.0
9286.	c8h18-3+oh=c8h17-3b+h2o	4.70E+07	1.6	-35.0
9287.	c8h18-3+oh=c8h17-3c+h2o	5.73E+10	0.5	63.0
9288.	c8h18-3+oh=c8h17-3d+h2o	4.70E+07	1.6	-35.0
9289.	c8h18-3+oh=c8h17-3e+h2o	4.70E+07	1.6	-35.0
9290.	c8h18-3+oh=c8h17-3f+h2o	4.70E+07	1.6	-35.0
9291.	c8h18-3+oh=c8h17-3g+h2o	5.28E+09	1.0	1590.0
9292.	c8h18-3+oh=c8h17-3z+h2o	5.28E+09	1.0	1590.0
9293.	c8h18-3+ch3=c8h17-3a+ch4	4.52E-01	3.6	7154.0
9294.	c8h18-3+ch3=c8h17-3b+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
9295.	c8h18-3+ch3=c8h17-3c+ch4	6.01E-10	6.4	893.0
9296.	c8h18-3+ch3=c8h17-3d+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
9297.	c8h18-3+ch3=c8h17-3e+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
9298.	c8h18-3+ch3=c8h17-3f+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
9299.	c8h18-3+ch3=c8h17-3g+ch4	4.52E-01	3.6	7154.0
9300.	c8h18-3+ch3=c8h17-3z+ch4	4.52E-01	3.6	7154.0
9301.	c8h18-3+ho2=c8h17-3a+h2o2	2.04E+01	3.6	17160.0
9302.	c8h18-3+ho2=c8h17-3b+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
9303.	c8h18-3+ho2=c8h17-3c+h2o2	6.50E+02	3.0	12090.0
9304.	c8h18-3+ho2=c8h17-3d+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
9305.	c8h18-3+ho2=c8h17-3e+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
9306.	c8h18-3+ho2=c8h17-3f+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
9307.	c8h18-3+ho2=c8h17-3g+h2o2	2.04E+01	3.6	17160.0
9308.	c8h18-3+ho2=c8h17-3z+h2o2	2.04E+01	3.6	17160.0
9309.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3a+ch3oh	2.17E+11	0.0	6548.0
9310.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3b+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
9311.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3c+ch3oh	2.29E+10	0.0	2873.0
9312.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3d+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
9313.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3e+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
9314.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3f+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
9315.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3g+ch3oh	2.17E+11	0.0	6548.0
9316.	c8h18-3+ch3o=c8h17-3z+ch3oh	2.17E+11	0.0	6548.0
9317.	c8h18-3+o2=c8h17-3a+ho2	3.00E+13	0.0	52800.0
9318.	c8h18-3+o2=c8h17-3b+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
9319.	c8h18-3+o2=c8h17-3c+ho2	1.00E+13	0.0	48200.0
9320.	c8h18-3+o2=c8h17-3d+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
9321.	c8h18-3+o2=c8h17-3e+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
9322.	c8h18-3+o2=c8h17-3f+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
9323.	c8h18-3+o2=c8h17-3g+ho2	3.00E+13	0.0	52800.0
9324.	c8h18-3+o2=c8h17-3z+ho2	3.00E+13	0.0	52800.0
9325.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3a+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
9326.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3b+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
9327.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3c+c2h6	1.00E+11	0.0	7900.0
9328.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3d+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
9329.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3e+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
9330.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3f+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
9331.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3g+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
9332.	c8h18-3+c2h5=c8h17-3z+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
9333.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3a+c2h4	5.00E+11	0.0	18000.0
9334.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3b+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
9335.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3c+c2h4	2.00E+11	0.0	14300.0
9336.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3d+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
9337.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3e+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
9338.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3f+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
9339.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3g+c2h4	5.00E+11	0.0	18000.0
9340.	c8h18-3+c2h3=c8h17-3z+c2h4	5.00E+11	0.0	18000.0
9341.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3a+ch3o2h	6.93E-01	4.0	18280.0
9342.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3b+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
9343.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3c+ch3o2h	2.06E+02	3.1	13190.0
9344.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3d+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
9345.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3e+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
9346.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3f+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
9347.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3g+ch3o2h	6.93E-01	4.0	18280.0
9348.	c8h18-3+ch3o2=c8h17-3z+ch3o2h	6.93E-01	4.0	18280.0
9349.	Bc5h11+c2h4=c7h15-3a	1.00E+11	0.0	8200.0
9350.	h+c7h14-1-3=c7h15-3a	1.00E+13	0.0	2900.0
9351.	nc3h7+c2c4h8=c7h15-3b	1.00E+11	0.0	8200.0
9352.	nc3h7+t2c4h8=c7h15-3b	1.00E+11	0.0	8200.0
9353.	ch3+c6h12-2=c7h15-3b	1.00E+11	0.0	8200.0
9354.	h+c7h14-1-3=c7h15-3b	1.00E+13	0.0	2900.0
9355.	h+c7h14-2-3=c7h15-3b	1.00E+13	0.0	2900.0
9356.	c2h5+ac5h10=c7h15-3c	1.00E+11	0.0	8200.0
9357.	ch3+ac6h12=c7h15-3c	1.00E+11	0.0	8200.0
9358.	h+c7h14-2-3=c7h15-3c	1.00E+13	0.0	2900.0
9359.	h+c7h14-3-3=c7h15-3c	1.00E+13	0.0	2900.0
9360.	h+c7h14-z-3=c7h15-3c	1.00E+13	0.0	2900.0
9361.	c2h5+t2c5h10=c7h15-3d	1.00E+11	0.0	8200.0
9362.	c2h5+c2c5h10=c7h15-3d	1.00E+11	0.0	8200.0
9363.	ch3+c6h12-3=c7h15-3d	1.00E+11	0.0	8200.0
9364.	ch3+lc6h12=c7h15-3d	1.00E+11	0.0	8200.0
9365.	h+c7h14-3-3=c7h15-3d	1.00E+13	0.0	2900.0
9366.	h+c7h14-4-3=c7h15-3d	1.00E+13	0.0	2900.0
9367.	sc4h9+c3h6=c7h15-3e	1.00E+11	0.0	8200.0
9368.	h+c7h14-4-3=c7h15-3e	1.00E+13	0.0	2900.0
9369.	h+c7h14-5-3=c7h15-3e	1.00E+13	0.0	2900.0
9370.	c7h15-3f=ac5h11+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
9371.	h+c7h14-5-3=c7h15-3f	1.00E+13	0.0	2900.0
9372.	c5h10+c2h5=c7h15-3z	1.00E+11	0.0	8200.0
9373.	c4h8+nc3h7=c7h15-3z	1.00E+11	0.0	8200.0
9374.	h+c7h14-z-3=c7h15-3z	1.00E+13	0.0	2900.0
9375.	c8h17-3a=Bc6h13+c2h4	2.00E+13	0.0	27700.0

9376. h+c8h16-1-3=c8h17-3a 2.50E+11 0.5 2620.0
9377. c8h17-3b=pc4h9+c2c4h8 1.00E+13 0.0 28700.0
9378. c8h17-3b=pc4h9+t2c4h8 1.00E+13 0.0 28700.0
9379. c8h17-3b=ch3+c7h14-2 2.00E+13 0.0 31000.0
9380. h+c8h16-1-3=c8h17-3b 4.24E+11 0.5 1230.0
9381. h+c8h16-3-3=c8h17-3b 2.50E+11 0.5 2620.0
9382. c8h17-3c=nc3h7+ac5h10 2.00E+13 0.0 28700.0
9383. c8h17-3c=ch3+c7h14-1-2 2.00E+13 0.0 31000.0
9384. h+c8h16-2-3=c8h17-3c 2.50E+11 0.5 2620.0
9385. h+c8h16-3-3=c8h17-3c 2.50E+11 0.5 2620.0
9386. h+c8h16-z-3=c8h17-3c 2.50E+11 0.5 2620.0
9387. c8h17-3d=c2h5+c6h12-2 2.00E+13 0.0 28700.0
9388. c8h17-3d=c2h5+1c6h12 2.00E+13 0.0 28700.0
9389. c8h17-3d=ch3+c7h14-3 2.00E+13 0.0 31000.0
9390. h+c8h16-3-3=c8h17-3d 2.50E+11 0.5 2620.0
9391. h+c8h16-4-3=c8h17-3d 2.50E+11 0.5 2620.0
9392. c8h17-3e=sc4h9+c4h8 2.00E+13 0.0 27700.0
9393. c8h17-3e=ch3+c7h14-5-3 2.00E+13 0.0 31000.0
9394. h+c8h16-4-3=c8h17-3e 2.50E+11 0.5 2620.0
9395. h+c8h16-5-3=c8h17-3e 2.50E+11 0.5 2620.0
9396. c8h17-3f=ac5h11+c3h6 2.00E+13 0.0 28700.0
9397. h+c8h16-5-3=c8h17-3f 2.50E+11 0.5 2620.0
9398. h+c8h16-6-3=c8h17-3f 2.50E+11 0.5 2620.0
9399. c8h17-3g=lc6h13+c2h4 2.00E+13 0.0 28700.0
9400. h+c8h16-6-3=c8h17-3g 2.50E+11 0.5 2620.0
9401. c8h17-3z=c2h5+c6h12-1 2.00E+13 0.0 28700.0
9402. c8h17-3z=c4h8+pc4h9 2.00E+13 0.0 28700.0
9403. h+c8h16-z-3=c8h17-3z 2.50E+11 0.5 2620.0
9404. c4h7chol-4+oh<=>c4h7co1-4+h2o 3.37E+12 0.0 -616.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.40E+12 0.0 30940.0
9405. c4h7chol-4+oh<=>c4h6cho1-43+h2o 2.08E+06 2.0 -298.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.19E+08 1.7 34980.0
9406. c4h7chol-4+oh<=>c4h6cho1-44+h2o 4.67E+07 1.6 -35.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.50E+09 1.3 28900.0
9407. c4h7chol-4+oh<=>ch3hco+ch2ch2hco 1.00E+11 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 5.34E+06 1.0 19260.0
9408. c4h7chol-4+ho2<=>c4h7co1-4+h2o2 1.00E+12 0.0 11920.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.22E+12 -0.3 12010.0
9409. c4h7chol-4+ho2<=>c4h6cho1-43+h2o2 9.64E+03 2.6 13910.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.26E+06 2.0 17730.0
9410. c4h7chol-4+ho2<=>c4h6cho1-44+h2o2 1.48E+04 2.6 13910.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.82E+06 2.0 11380.0
9411. c4h7chol-4+ch3o2<=>c4h7co1-4+ch3o2h 2.80E+12 0.0 13600.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.86E+13 -0.5 12970.0
9412. c4h7chol-4+ch3o2<=>c4h6cho1-43+ch3o2h 1.99E+12 0.0 17050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.77E+15 -0.8 20150.0
9413. c4h7chol-4+ch3o2<=>c4h6cho1-44+ch3o2h 1.99E+12 0.0 17050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.56E+15 -0.8 13800.0
9414. c4h7co1-4<=>Dc4h7-1+co 7.37E+18 -1.8 15230.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.50E+11 0.0 4810.0
9415. c4h6cho1-43<=>c4h6+hco 4.83E+15 -0.8 33540.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 7800.0
9416. c4h6cho1-44<=>acrol+c2h3 2.12E+14 -0.4 37160.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 7800.0
9417. c7h15-3a=c7h15-3d 6.92E+00 3.2 16558.0
9418. c7h15-3a=c7h15-3e 1.82E+02 2.5 10960.0
9419. c7h15-3c=c7h15-3f 1.62E+02 2.6 17720.0
9420. c7h15-3f=c7h15-3b 1.82E+02 2.5 10960.0
9421. c7h15-3z=c7h15-3e 6.92E+00 3.2 16558.0
9422. c8h17-3a=c8h17-3d 6.92E+00 3.2 16558.0
9423. c8h17-3a=c8h17-3e 1.82E+02 2.5 10960.0
9424. c8h17-3a=c8h17-3f 2.96E+00 3.1 11020.0
9425. c8h17-3g=c8h17-3b 2.96E+00 3.1 11020.0
9426. c8h17-3f=c8h17-3b 6.31E+00 3.1 13180.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.31E+00 3.1 13180.0
9427. c8h17-3e=c8h17-3b 1.29E+00 3.3 16150.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.29E+00 3.3 16150.0
9428. c8h17-3g=c8h17-3d 6.92E+00 3.2 16558.0
9429. c8h17-3z=c8h17-3e 6.92E+00 3.2 16558.0
9430. c8h17-3z=c8h17-3f 1.82E+02 2.5 10960.0
9431. c7h14-1-3+oh=c7h13-1-3+h2o 3.28E+08 1.6 -35.0
9432. c7h14-2-3+oh=c7h13-1-3+h2o 3.28E+08 1.6 -35.0
9433. c7h14-3-3+oh=c7h13-1-3+h2o 3.28E+08 1.6 -35.0
9434. c7h14-4-3+oh=c7h13-1-3+h2o 3.28E+08 1.6 -35.0
9435. c7h14-5-3+oh=c7h13-1-3+h2o 3.28E+08 1.6 -35.0
9436. c7h14-1-3+ho2=c7h13-1-3+h2o2 4.42E+02 3.4 13720.0
9437. c7h14-2-3+ho2=c7h13-1-3+h2o2 4.42E+02 3.4 13720.0
9438. c7h14-3-3+ho2=c7h13-1-3+h2o2 4.42E+02 3.4 13720.0
9439. c7h14-4-3+ho2=c7h13-1-3+h2o2 4.42E+02 3.4 13720.0
9440. c7h14-5-3+ho2=c7h13-1-3+h2o2 4.42E+02 3.4 13720.0
9441. c7h14-1-3+h=c7h13-1-3+h2 9.10E+06 2.4 4471.0
9442. c7h14-2-3+h=c7h13-1-3+h2 9.10E+06 2.4 4471.0
9443. c7h14-3-3+h=c7h13-1-3+h2 9.10E+06 2.4 4471.0
9444. c7h14-4-3+h=c7h13-1-3+h2 9.10E+06 2.4 4471.0
9445. c7h14-5-3+h=c7h13-1-3+h2 9.10E+06 2.4 4471.0
9446. c7h14-1-3+ch3=c7h13-1-3+ch4 1.06E+01 3.5 5481.0
9447. c7h14-2-3+ch3=c7h13-1-3+ch4 1.06E+01 3.5 5481.0
9448. c7h14-3-3+ch3=c7h13-1-3+ch4 1.06E+01 3.5 5481.0
9449. c7h14-4-3+ch3=c7h13-1-3+ch4 1.06E+01 3.5 5481.0
9450. c7h14-5-3+ch3=c7h13-1-3+ch4 1.06E+01 3.5 5481.0
9451. c7h14-1-3+o=c7h13-1-3+oh 3.86E+06 2.5 2830.0
9452. c7h14-2-3+o=c7h13-1-3+oh 3.86E+06 2.5 2830.0
9453. c7h14-3-3+o=c7h13-1-3+oh 3.86E+06 2.5 2830.0
9454. c7h14-4-3+o=c7h13-1-3+oh 3.86E+06 2.5 2830.0
9455. c7h14-5-3+o=c7h13-1-3+oh 3.86E+06 2.5 2830.0
9456. c8h16-1-3+oh=c8h15-1-3+h2o 3.74E+08 1.6 -35.0
9457. c8h16-2-3+oh=c8h15-1-3+h2o 3.74E+08 1.6 -35.0
9458. c8h16-3-3+oh=c8h15-1-3+h2o 3.74E+08 1.6 -35.0
9459. c8h16-4-3+oh=c8h15-1-3+h2o 3.74E+08 1.6 -35.0
9460. c8h16-5-3+oh=c8h15-1-3+h2o 3.74E+08 1.6 -35.0
9461. c8h16-6-3+oh=c8h15-1-3+h2o 3.74E+08 1.6 -35.0
9462. c8h16-1-3+ho2=c8h15-1-3+h2o2 5.06E+02 3.4 13720.0
9463. c8h16-2-3+ho2=c8h15-1-3+h2o2 5.06E+02 3.4 13720.0
9464. c8h16-3-3+ho2=c8h15-1-3+h2o2 5.06E+02 3.4 13720.0
9465. c8h16-4-3+ho2=c8h15-1-3+h2o2 5.06E+02 3.4 13720.0
9466. c8h16-5-3+ho2=c8h15-1-3+h2o2 5.06E+02 3.4 13720.0
9467. c8h16-6-3+ho2=c8h15-1-3+h2o2 5.06E+02 3.4 13720.0
9468. c8h16-1-3+h=c8h15-1-3+h2 1.04E+07 2.4 4471.0
9469. c8h16-2-3+h=c8h15-1-3+h2 1.04E+07 2.4 4471.0
9470. c8h16-3-3+h=c8h15-1-3+h2 1.04E+07 2.4 4471.0
9471. c8h16-4-3+h=c8h15-1-3+h2 1.04E+07 2.4 4471.0
9472. c8h16-5-3+h=c8h15-1-3+h2 1.04E+07 2.4 4471.0
9473. c8h16-6-3+h=c8h15-1-3+h2 1.04E+07 2.4 4471.0
9474. c8h16-1-3+ch3=c8h15-1-3+ch4 1.21E+01 3.5 5481.0
9475. c8h16-2-3+ch3=c8h15-1-3+ch4 1.21E+01 3.5 5481.0
9476. c8h16-3-3+ch3=c8h15-1-3+ch4 1.21E+01 3.5 5481.0
9477. c8h16-4-3+ch3=c8h15-1-3+ch4 1.21E+01 3.5 5481.0
9478. c8h16-5-3+ch3=c8h15-1-3+ch4 1.21E+01 3.5 5481.0
9479. c8h16-6-3+ch3=c8h15-1-3+ch4 1.21E+01 3.5 5481.0
9480. c8h16-1-3+o=c8h15-1-3+oh 4.42E+06 2.5 2830.0
9481. c8h16-2-3+o=c8h15-1-3+oh 4.42E+06 2.5 2830.0
9482. c8h16-3-3+o=c8h15-1-3+oh 4.42E+06 2.5 2830.0
9483. c8h16-4-3+o=c8h15-1-3+oh 4.42E+06 2.5 2830.0
9484. c8h16-5-3+o=c8h15-1-3+oh 4.42E+06 2.5 2830.0
9485. c8h16-6-3+o=c8h15-1-3+oh 4.42E+06 2.5 2830.0
9486. c7h14-1-3+oh=ch2o+Cc6h13 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9487. c7h14-1-3+oh=aceton+pc4h9 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9488. c7h14-3-3+oh=aceton+pc4h9 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9489. c7h14-3-3+oh=ethco+ic4h9 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9490. c7h14-4-3+oh=ethco+ic4h9 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9491. c7h14-4-3+oh=ch3hco+dc5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9492. c7h14-5-3+oh=ch3hco+dc5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9493. c7h14-5-3+oh=ch2o+ec6h13 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9494. c7h14-1-3+o=ch2o+c6h12-3 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9495. c7h14-1-3+o=aceton+c4h8 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9496. c7h14-3-3+o=aceton+c4h8 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9497. c7h14-3-3+o=ethco+ic4h8 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9498. c7h14-4-3+o=ethco+ic4h8 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9499. c7h14-4-3+o=ch3hco+cc5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9500. c7h14-5-3+o=ch3hco+cc5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9501. c7h14-5-3+o=ch2o+dc6h12 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9502. c8h16-1-3+oh=ch2o+Cc7h15 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9503. c8h16-1-3+oh=aceton+Ac5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9504. c8h16-3-3+oh=aceton+Ac5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9505. c8h16-3-3+oh=nc3h7hco+ic4h9 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9506. c8h16-4-3+oh=nc3h7hco+ic4h9 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9507. c8h16-4-3+oh=ethco+dc5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9508. c8h16-5-3+oh=ethco+dc5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9509. c8h16-5-3+oh=ch3hco+ec6h13 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9510. c8h16-6-3+oh=ch3hco+ec6h13 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9511. c8h16-6-3+oh=ch2o+c7h15-3f 1.00E+11 0.0 -4000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9512. c8h16-1-3+o=ch2o+c7h14-3 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9513. c8h16-1-3+o=aceton+c5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9514. c8h16-3-3+o=aceton+c5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9515. c8h16-3-3+o=nc3h7hco+ic4h8 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9516. c8h16-4-3+o=nc3h7hco+ic4h8 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9517. c8h16-4-3+o=ethco+cc5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9518. c8h16-5-3+o=ethco+cc5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9519. c8h16-5-3+o=ch3hco+dc6h12 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9520. c8h16-6-3+o=ch3hco+dc6h12 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9521. c8h16-6-3+o=ch2o+c7h14-5-3 1.00E+11 0.0 -1050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9522. c7h13-1-3+ho2<=>ac3h5hco+nc3h7+oh 9.64E+12 0.0 0.0
9523. c7h13-1-3+ch3o2<=>ac3h5hco+nc3h7+ch3o 9.64E+12 0.0 0.0
9524. c7h13-1-3+c2h5o2<=>ac3h5hco+nc3h7+c2h5o 9.64E+12 0.0 0.0
9525. c8h15-1-3+ho2<=>ac3h5hco+pc4h9+oh 9.64E+12 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9526. c8h15-1-3+ch3o2<=>ac3h5hco+pc4h9+ch3o 9.64E+12 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9527. c8h15-1-3+c2h5o2<=>ac3h5hco+pc4h9+c2h5o 9.64E+12 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9528. c7h13-1-3=c3h6+c4h712 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9529. c7h13-1-3=ac5h10+c2h3 2.50E+13 0.0 35000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9530. c7h13-1-3=tc3h5+t2c4h8 2.50E+13 0.0 35000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9531. c7h13-1-3=tc3h5+c2c4h8 2.50E+13 0.0 35000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9532. c7h13-1-3=Cc4h7-1+c3h6 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9533. c7h13-1-3=ic5h9+c2h4 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9534. c8h15-1-3=c4h8+c4h712 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9535. c8h15-1-3=ac5h10+tc3h5 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9536. c8h15-1-3=lc6h12+c2h3 2.50E+13 0.0 35000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9537. c8h15-1-3=Ac4h7-1+t2c4h8 2.50E+13 0.0 35000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9538. c8h15-1-3=Ac4h7-1+c2c4h8 2.50E+13 0.0 35000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0

9539. c8h15-1-3=Cc4h7-1+c4h8 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9540. c8h15-1-3=ic5h9+c3h6 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9541. c8h15-1-3=ic6h11+c2h4 2.50E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 9600.0
9542. c8h16-1-3=Cc4h7-1+pc4h9 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9543. c8h16-2-3=ic5h9+nc3h7 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9544. c8h16-3-3=ic6h11+c2h5 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9545. c8h16-4-3=c7h13-1-3+ch3 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9546. c8h16-4-3=c2h5+Ac6h11-3 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9547. c8h16-5-3=c4h722+sc4h9 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9548. c8h16-6-3=ic5h9+nc3h7 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9549. c8h16-z-3=ic4h7+pc4h9 2.50E+16 0.0 71000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+13 0.0 0.0
9550. c8h17-3a+o2=c8h17oo-1-3 9.00E+17 -2.5 0.0
9551. c8h17-3b+o2=c8h17oo-2-3 9.50E+17 -2.5 0.0
9552. c8h17-3c+o2=c8h17oo-3-3 2.60E+18 -2.5 0.0
9553. c8h17-3d+o2=c8h17oo-4-3 1.05E+18 -2.5 0.0
9554. c8h17-3e+o2=c8h17oo-5-3 1.80E+18 -2.5 0.0
9555. c8h17-3f+o2=c8h17oo-6-3 1.70E+18 -2.5 0.0
9556. c8h17-3g+o2=c8h17oo-7-3 9.00E+17 -2.5 0.0
9557. c8h17-3z+o2=c8h17oo-z-3 1.50E+17 -2.5 0.0
9558. c8h17-3a+c8h17oo-1-3=c8h17o-1-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9559. c8h17-3a+c8h17oo-2-3=c8h17o-1-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9560. c8h17-3a+c8h17oo-3-3=c8h17o-1-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9561. c8h17-3a+c8h17oo-4-3=c8h17o-1-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9562. c8h17-3a+c8h17oo-5-3=c8h17o-1-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9563. c8h17-3a+c8h17oo-6-3=c8h17o-1-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9564. c8h17-3a+c8h17oo-7-3=c8h17o-1-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9565. c8h17-3a+c8h17oo-z-3=c8h17o-1-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9566. c8h17-3b+c8h17oo-1-3=c8h17o-2-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9567. c8h17-3b+c8h17oo-2-3=c8h17o-2-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9568. c8h17-3b+c8h17oo-3-3=c8h17o-2-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9569. c8h17-3b+c8h17oo-4-3=c8h17o-2-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9570. c8h17-3b+c8h17oo-5-3=c8h17o-2-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9571. c8h17-3b+c8h17oo-6-3=c8h17o-2-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9572. c8h17-3b+c8h17oo-7-3=c8h17o-2-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9573. c8h17-3b+c8h17oo-z-3=c8h17o-2-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9574. c8h17-3c+c8h17oo-1-3=c8h17o-3-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9575. c8h17-3c+c8h17oo-2-3=c8h17o-3-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9576. c8h17-3c+c8h17oo-3-3=c8h17o-3-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9577. c8h17-3c+c8h17oo-4-3=c8h17o-3-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9578. c8h17-3c+c8h17oo-5-3=c8h17o-3-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9579. c8h17-3c+c8h17oo-6-3=c8h17o-3-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9580. c8h17-3c+c8h17oo-7-3=c8h17o-3-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9581. c8h17-3c+c8h17oo-z-3=c8h17o-3-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9582. c8h17-3d+c8h17oo-1-3=c8h17o-4-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9583. c8h17-3d+c8h17oo-2-3=c8h17o-4-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9584. c8h17-3d+c8h17oo-3-3=c8h17o-4-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9585. c8h17-3d+c8h17oo-4-3=c8h17o-4-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9586. c8h17-3d+c8h17oo-5-3=c8h17o-4-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9587. c8h17-3d+c8h17oo-6-3=c8h17o-4-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9588. c8h17-3d+c8h17oo-7-3=c8h17o-4-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9589. c8h17-3d+c8h17oo-z-3=c8h17o-4-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9590. c8h17-3e+c8h17oo-1-3=c8h17o-5-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9591. c8h17-3e+c8h17oo-2-3=c8h17o-5-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9592. c8h17-3e+c8h17oo-3-3=c8h17o-5-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9593. c8h17-3e+c8h17oo-4-3=c8h17o-5-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9594. c8h17-3e+c8h17oo-5-3=c8h17o-5-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9595. c8h17-3e+c8h17oo-6-3=c8h17o-5-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9596. c8h17-3e+c8h17oo-7-3=c8h17o-5-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9597. c8h17-3e+c8h17oo-z-3=c8h17o-5-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9598. c8h17-3f+c8h17oo-1-3=c8h17o-6-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9599. c8h17-3f+c8h17oo-2-3=c8h17o-6-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9600. c8h17-3f+c8h17oo-3-3=c8h17o-6-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9601. c8h17-3f+c8h17oo-4-3=c8h17o-6-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9602. c8h17-3f+c8h17oo-5-3=c8h17o-6-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9603. c8h17-3f+c8h17oo-6-3=c8h17o-6-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9604. c8h17-3f+c8h17oo-7-3=c8h17o-6-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9605. c8h17-3f+c8h17oo-z-3=c8h17o-6-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9606. c8h17-3g+c8h17oo-1-3=c8h17o-7-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9607. c8h17-3g+c8h17oo-2-3=c8h17o-7-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9608. c8h17-3g+c8h17oo-3-3=c8h17o-7-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9609. c8h17-3g+c8h17oo-4-3=c8h17o-7-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9610. c8h17-3g+c8h17oo-5-3=c8h17o-7-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9611. c8h17-3g+c8h17oo-6-3=c8h17o-7-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9612. c8h17-3g+c8h17oo-7-3=c8h17o-7-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9613. c8h17-3g+c8h17oo-z-3=c8h17o-7-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9614. c8h17-3z+c8h17oo-1-3=c8h17o-7-3+c8h17o-1-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9615. c8h17-3z+c8h17oo-2-3=c8h17o-7-3+c8h17o-2-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9616. c8h17-3z+c8h17oo-3-3=c8h17o-7-3+c8h17o-3-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9617. c8h17-3z+c8h17oo-4-3=c8h17o-7-3+c8h17o-4-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9618. c8h17-3z+c8h17oo-5-3=c8h17o-7-3+c8h17o-5-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9619. c8h17-3z+c8h17oo-6-3=c8h17o-7-3+c8h17o-6-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9620. c8h17-3z+c8h17oo-7-3=c8h17o-7-3+c8h17o-7-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9621. c8h17-3z+c8h17oo-z-3=c8h17o-7-3+c8h17o-z-3 7.00E+12 0.0 -1000.0
9622. c8h17-3a+ho2=c8h17o-1-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9623. c8h17-3b+ho2=c8h17o-2-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9624. c8h17-3c+ho2=c8h17o-3-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9625. c8h17-3d+ho2=c8h17o-4-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9626. c8h17-3e+ho2=c8h17o-5-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9627. c8h17-3f+ho2=c8h17o-6-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9628. c8h17-3g+ho2=c8h17o-7-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9629. c8h17-3z+ho2=c8h17o-z-3+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
9630. c8h17-3a+ch3o2=c8h17o-1-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9631. c8h17-3b+ch3o2=c8h17o-2-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9632. c8h17-3c+ch3o2=c8h17o-3-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9633. c8h17-3d+ch3o2=c8h17o-4-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9634. c8h17-3e+ch3o2=c8h17o-5-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9635. c8h17-3f+ch3o2=c8h17o-6-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9636. c8h17-3g+ch3o2=c8h17o-7-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9637. c8h17-3z+ch3o2=c8h17o-z-3+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
9638. c8h17oo-1-3=c8ooh1-3b 2.00E+11 0.0 26450.0
9639. c8h17oo-1-3=c8ooh1-3c 1.25E+10 0.0 18700.0
9640. c8h17oo-1-3=c8ooh1-3d 3.12E+09 0.0 18650.0
9641. c8h17oo-1-3=c8ooh1-3e 3.91E+08 0.0 21650.0
9642. c8h17oo-1-3=c8ooh1-3z 4.68E+09 0.0 21950.0
9643. c8h17oo-2-3=c8ooh2-3a 3.00E+11 0.0 29000.0
9644. c8h17oo-2-3=c8ooh2-3c 1.00E+11 0.0 23700.0
9645. c8h17oo-2-3=c8ooh2-3d 2.50E+10 0.0 20450.0
9646. c8h17oo-2-3=c8ooh2-3e 3.12E+09 0.0 18650.0
9647. c8h17oo-2-3=c8ooh2-3f 3.91E+08 0.0 21650.0
9648. c8h17oo-2-3=c8ooh2-3z 3.75E+10 0.0 24000.0
9649. c8h17oo-3-3=c8ooh3-3a 3.75E+10 0.0 24000.0
9650. c8h17oo-3-3=c8ooh3-3b 2.00E+11 0.0 26450.0
9651. c8h17oo-3-3=c8ooh3-3d 2.00E+11 0.0 26450.0
9652. c8h17oo-3-3=c8ooh3-3e 2.50E+10 0.0 20450.0
9653. c8h17oo-3-3=c8ooh3-3f 3.12E+09 0.0 18650.0
9654. c8h17oo-3-3=c8ooh3-3g 5.85E+08 0.0 25150.0
9655. c8h17oo-3-3=c8ooh3-3z 3.00E+11 0.0 29000.0
9656. c8h17oo-z-3=c8oohz-3a 4.68E+09 0.0 21950.0
9657. c8h17oo-z-3=c8oohz-3b 2.50E+10 0.0 20450.0
9658. c8h17oo-z-3=c8oohz-3c 1.00E+11 0.0 23700.0
9659. c8h17oo-z-3=c8oohz-3d 2.50E+10 0.0 20450.0
9660. c8h17oo-z-3=c8oohz-3e 3.12E+09 0.0 18650.0
9661. c8h17oo-z-3=c8oohz-3f 3.91E+08 0.0 21650.0
9662. c8h17oo-4-3=c8ooh4-3a 4.68E+09 0.0 21950.0
9663. c8h17oo-4-3=c8ooh4-3b 2.50E+10 0.0 20450.0
9664. c8h17oo-4-3=c8ooh4-3c 1.00E+11 0.0 23700.0
9665. c8h17oo-4-3=c8ooh4-3e 2.00E+11 0.0 26450.0
9666. c8h17oo-4-3=c8ooh4-3f 2.50E+10 0.0 20450.0
9667. c8h17oo-4-3=c8ooh4-3g 4.68E+09 0.0 21950.0
9668. c8h17oo-4-3=c8ooh4-3z 3.75E+10 0.0 24000.0
9669. c8h17oo-5-3=c8ooh5-3a 5.85E+08 0.0 25150.0
9670. c8h17oo-5-3=c8ooh5-3b 3.12E+09 0.0 18650.0
9671. c8h17oo-5-3=c8ooh5-3c 1.25E+10 0.0 18700.0
9672. c8h17oo-5-3=c8ooh5-3d 2.00E+11 0.0 26450.0
9673. c8h17oo-5-3=c8ooh5-3f 2.00E+11 0.0 26450.0
9674. c8h17oo-5-3=c8ooh5-3g 3.75E+10 0.0 24000.0
9675. c8h17oo-5-3=c8ooh5-3z 4.68E+09 0.0 21950.0
9676. c8h17oo-6-3=c8ooh6-3b 3.91E+08 0.0 21650.0
9677. c8h17oo-6-3=c8ooh6-3c 1.56E+09 0.0 16650.0
9678. c8h17oo-6-3=c8ooh6-3d 2.50E+10 0.0 20450.0
9679. c8h17oo-6-3=c8ooh6-3e 2.00E+11 0.0 26450.0
9680. c8h17oo-6-3=c8ooh6-3g 3.00E+11 0.0 29000.0
9681. c8h17oo-6-3=c8ooh6-3z 5.85E+08 0.0 25150.0
9682. c8h17oo-7-3=c8ooh7-3c 1.95E+08 0.0 19650.0
9683. c8h17oo-7-3=c8ooh7-3d 3.12E+09 0.0 18650.0
9684. c8h17oo-7-3=c8ooh7-3e 2.50E+10 0.0 20450.0
9685. c8h17oo-7-3=c8ooh7-3f 2.00E+11 0.0 26450.0
9686. c8h17oo-1-3<=>c8h16-1-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9687. c8h17oo-z-3<=>c8h16-z-3+ho2 2.27E+35 -7.2 39440.0
9688. c8h17oo-2-3<=>c8h16-1-3+ho2 5.92E+42 -9.4 41530.0
9689. c8h17oo-2-3<=>c8h16-2-3+ho2 2.27E+35 -7.2 39440.0
9690. c8h17oo-3-3<=>c8h16-z-3+ho2 5.92E+42 -9.4 41530.0
9691. c8h17oo-3-3<=>c8h16-2-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9692. c8h17oo-3-3<=>c8h16-3-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9693. c8h17oo-4-3<=>c8h16-3-3+ho2 2.27E+35 -7.2 39440.0
9694. c8h17oo-4-3<=>c8h16-4-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9695. c8h17oo-5-3<=>c8h16-4-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9696. c8h17oo-5-3<=>c8h16-5-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9697. c8h17oo-6-3<=>c8h16-5-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9698. c8h17oo-6-3<=>c8h16-6-3+ho2 5.92E+42 -9.4 41530.0
9699. c8h17oo-7-3<=>c8h16-6-3+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
9700. c8h17oo-1-3+ho2=c8h17ooh-1-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9701. c8h17oo-2-3+ho2=c8h17ooh-2-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9702. c8h17oo-3-3+ho2=c8h17ooh-3-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9703. c8h17oo-4-3+ho2=c8h17ooh-4-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9704. c8h17oo-5-3+ho2=c8h17ooh-5-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9705. c8h17oo-6-3+ho2=c8h17ooh-6-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9706. c8h17oo-7-3+ho2=c8h17ooh-7-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9707. c8h17oo-z-3+ho2=c8h17ooh-z-3+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
9708. c8h17oo-1-3+h2o2=c8h17ooh-1-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9709. c8h17oo-2-3+h2o2=c8h17ooh-2-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9710. c8h17oo-3-3+h2o2=c8h17ooh-3-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9711. c8h17oo-4-3+h2o2=c8h17ooh-4-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9712. c8h17oo-5-3+h2o2=c8h17ooh-5-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9713. c8h17oo-6-3+h2o2=c8h17ooh-6-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9714. c8h17oo-7-3+h2o2=c8h17ooh-7-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9715. c8h17oo-z-3+h2o2=c8h17ooh-z-3+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
9716. c8h17oo-1-3+ch3o2=c8h17o-1-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9717. c8h17oo-2-3+ch3o2=c8h17o-2-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9718. c8h17oo-3-3+ch3o2=c8h17o-3-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9719. c8h17oo-4-3+ch3o2=c8h17o-4-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9720. c8h17oo-5-3+ch3o2=c8h17o-5-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9721. c8h17oo-6-3+ch3o2=c8h17o-6-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9722. c8h17oo-7-3+ch3o2=c8h17o-7-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9723. c8h17oo-z-3+ch3o2=c8h17o-z-3+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9724. c8h17oo-1-3+c8h17oo-1-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-1-3+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9725. c8h17oo-1-3+c8h17oo-2-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-2-3+o2
9726. c8h17oo-1-3+c8h17oo-3-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-3-3+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9727. c8h17oo-1-3+c8h17oo-4-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-4-3+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9728. c8h17oo-1-3+c8h17oo-5-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-5-3+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9729. c8h17oo-1-3+c8h17oo-6-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-6-3+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9730. c8h17oo-1-3+c8h17oo-7-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-7-3+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9731. c8h17oo-1-3+c8h17oo-z-3 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-3+c8h17o-z-3+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
9732. c8h17oo-2-3+c8h17oo-2-3 1.40E+16 -1.6 1860.0

```
    =c8h17o-2-3+c8h17o-2-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9733. c8h17oo-2-3+c8h17oo-3-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-2-3+c8h17o-3-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9734. c8h17oo-2-3+c8h17oo-4-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-2-3+c8h17o-4-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9735. c8h17oo-2-3+c8h17oo-5-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-2-3+c8h17o-5-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9736. c8h17oo-2-3+c8h17oo-6-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-2-3+c8h17o-6-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9737. c8h17oo-2-3+c8h17oo-7-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-2-3+c8h17o-7-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9738. c8h17oo-2-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-2-3+c8h17o-z-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9739. c8h17oo-3-3+c8h17oo-3-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-3-3+c8h17o-3-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9740. c8h17oo-3-3+c8h17oo-4-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-3-3+c8h17o-4-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9741. c8h17oo-3-3+c8h17oo-5-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-3-3+c8h17o-5-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9742. c8h17oo-3-3+c8h17oo-6-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-3-3+c8h17o-6-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9743. c8h17oo-3-3+c8h17oo-7-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-3-3+c8h17o-7-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9744. c8h17oo-3-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-3-3+c8h17o-z-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9745. c8h17oo-4-3+c8h17oo-4-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-4-3+c8h17o-4-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9746. c8h17oo-4-3+c8h17oo-5-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-4-3+c8h17o-5-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9747. c8h17oo-4-3+c8h17oo-6-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-4-3+c8h17o-6-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9748. c8h17oo-4-3+c8h17oo-7-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-4-3+c8h17o-7-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9749. c8h17oo-4-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-4-3+c8h17o-z-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9750. c8h17oo-5-3+c8h17oo-5-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-5-3+c8h17o-5-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9751. c8h17oo-5-3+c8h17oo-6-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-5-3+c8h17o-6-3+o2
9752. c8h17oo-5-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-5-3+c8h17o-7-3+o2
9753. c8h17oo-5-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-5-3+c8h17o-z-3+o2
9754. c8h17oo-6-3+c8h17oo-6-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-6-3+c8h17o-6-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9755. c8h17oo-6-3+c8h17oo-7-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-6-3+c8h17o-7-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9756. c8h17oo-6-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-6-3+c8h17o-z-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9757. c8h17oo-7-3+c8h17oo-7-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-7-3+c8h17o-7-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9758. c8h17oo-7-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-7-3+c8h17o-z-3+o2
9759. c8h17oo-z-3+c8h17oo-z-3                  1.40E+16   -1.6    1860.0
    =c8h17o-z-3+c8h17o-z-3+o2
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9760. c8h17ooh-1-3=c8h17o-1-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9761. c8h17ooh-2-3=c8h17o-2-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9762. c8h17ooh-3-3=c8h17o-3-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9763. c8h17ooh-4-3=c8h17o-4-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9764. c8h17ooh-5-3=c8h17o-5-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9765. c8h17ooh-6-3=c8h17o-6-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9766. c8h17ooh-7-3=c8h17o-7-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9767. c8h17ooh-z-3=c8h17o-z-3+oh               1.00E+16    0.0   39000.0
9768. ch2o+c7h15-2a=c8h17o-1-3                 1.00E+11    0.0   11900.0
9769. ch3hco+Bc6h13=c8h17o-2-3                 1.00E+11    0.0   11900.0
9770. butanone+pc4h9=c8h17o-3-3                1.00E+11    0.0   11900.0
9771. nc3h7hco+sc4h9=c8h17o-4-3                1.00E+11    0.0   11900.0
9772. ethco+ac5h11=c8h17o-5-3                  1.00E+11    0.0   11900.0
9773. ch3hco+nc6h13=c8h17o-6-3                 1.00E+11    0.0   11900.0
9774. ch2o+c7h15-3c=c8h17o-7-3                 1.00E+11    0.0   11900.0
9775. ch2o+Cc7h15=c8h17o-z-3                   1.00E+11    0.0   11900.0
9776. c8ooh1-3b=c8h16o1-2-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9777. c8ooh2-3a=c8h16o1-2-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9778. c8ooh2-3c=c8h16o2-3-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9779. c8ooh3-3b=c8h16o2-3-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9780. c8ooh3-3d=c8h16o3-4-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9781. c8ooh3-3z=c8h16o3-z-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9782. c8oohz-3c=c8h16o3-z-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9783. c8ooh4-3c=c8h16o3-4-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9784. c8ooh4-3e=c8h16o4-5-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9785. c8ooh5-3d=c8h16o4-5-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9786. c8ooh5-3f=c8h16o5-6-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9787. c8ooh6-3e=c8h16o5-6-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9788. c8ooh6-3g=c8h16o6-7-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9789. c8ooh7-3f=c8h16o6-7-3+oh                 6.00E+11    0.0   22000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9790. c8ooh1-3c=c8h16o1-3-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9791. c8ooh2-3d=c8h16o2-4-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9792. c8ooh2-3z=c8h16o2-z-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9793. c8ooh3-3a=c8h16o1-3-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9794. c8ooh3-3e=c8h16o3-5-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9795. c8oohz-3b=c8h16o2-z-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9796. c8oohz-3d=c8h16o4-z-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9797. c8ooh4-3b=c8h16o2-4-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9798. c8ooh4-3f=c8h16o4-6-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9799. c8ooh4-3z=c8h16o4-z-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9800. c8ooh5-3c=c8h16o3-5-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9801. c8ooh5-3g=c8h16o5-7-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9802. c8ooh6-3d=c8h16o4-6-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9803. c8ooh7-3e=c8h16o5-7-3+oh                 7.50E+10    0.0   15300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9804. c8ooh1-3d=c8h16o1-4-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9805. c8ooh1-3z=c8h16o1-z-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9806. c8ooh2-3e=c8h16o2-5-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9807. c8ooh3-3f=c8h16o3-6-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9808. c8oohz-3a=c8h16o1-z-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9809. c8oohz-3e=c8h16o5-z-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9810. c8ooh4-3g=c8h16o4-7-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9811. c8ooh4-3a=c8h16o1-4-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9812. c8ooh5-3b=c8h16o2-5-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9813. c8ooh5-3z=c8h16o5-z-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9814. c8ooh6-3c=c8h16o3-6-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9815. c8ooh7-3d=c8h16o4-7-3+oh                 9.38E+09    0.0    7000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9816. c8ooh1-3e=c8h16o1-5-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9817. c8ooh2-3f=c8h16o2-6-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9818. c8ooh3-3g=c8h16o3-7-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9819. c8oohz-3f=c8h16o6-z-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9820. c8ooh5-3a=c8h16o1-5-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9821. c8ooh6-3b=c8h16o2-6-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9822. c8ooh6-3z=c8h16o6-z-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9823. c8ooh7-3c=c8h16o3-7-3+oh                 1.17E+09    0.0    1800.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9824. c8h16-1-3+ho2=c8ooh1-3b                  1.00E+11    0.0   11900.0
9825. c8h16-1-3+ho2=c8ooh2-3a                  1.00E+11    0.0   11900.0
9826. c8h16-2-3+ho2=c8ooh2-3c                  1.00E+11    0.0   11900.0
9827. c8h16-2-3+ho2=c8ooh3-3b                  1.00E+11    0.0   11900.0
9828. c8h16-3-3+ho2=c8ooh3-3d                  1.00E+11    0.0   11900.0
9829. c8h16-3-3+ho2=c8ooh4-3c                  1.00E+11    0.0   11900.0
9830. c8h16-z-3+ho2=c8ooh3-3z                  1.00E+11    0.0   11900.0
9831. c8h16-z-3+ho2=c8oohz-3c                  1.00E+11    0.0   11900.0
9832. c8h16-4-3+ho2=c8ooh4-3e                  1.00E+11    0.0   11900.0
9833. c8h16-4-3+ho2=c8ooh5-3d                  1.00E+11    0.0   11900.0
9834. c8h16-5-3+ho2=c8ooh5-3f                  1.00E+11    0.0   11900.0
9835. c8h16-5-3+ho2=c8ooh6-3e                  1.00E+11    0.0   11900.0
9836. c8h16-6-3+ho2=c8ooh6-3g                  1.00E+11    0.0   11900.0
9837. c8h16-6-3+ho2=c8ooh7-3f                  1.00E+11    0.0   11900.0
9838. c8ooh1-3c=c7h14-1-2+ch2o+oh              1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9839. c8ooh2-3d=c6h12-2+ch3hco+oh              1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9840. c8ooh2-3z=c6h12-1+ch3hco+oh              1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9841. c8ooh3-3e=c4h8+butanone+oh               1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9842. c8ooh3-3a=c2h4+nc4h9coch3+oh             1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9843. c8oohz-3b=c7h14-2+ch2o+oh                1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9844. c8oohz-3d=c7h14-3+ch2o+oh                1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9845. c8ooh4-3b=t2c4h8+nc3h7hco+oh             1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9846. c8ooh4-3b=c2c4h8+nc3h7hco+oh             1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9847. c8ooh4-3f=c3h6+ic4h9cho+oh               1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9848. c8ooh4-3z=c4h8+nc3h7hco+oh               1.00E+13    0.0   30000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
9849. c8ooh5-3c=ac5h10+ethco+oh                1.00E+13    0.0   30000.0
```

Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9850. c8ooh5-3g=c2h4+ic5h11cho+oh	1.00E+13	0.0	30000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9851. c8ooh6-3d=1c6h12+ch3hco+oh	1.00E+13	0.0	30000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9852. c8ooh7-3e=c7h14-5-3+ch2o+oh	1.00E+13	0.0	30000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9853. c8ooh1-3b+o2=c8ooh1-oo2-3	7.54E+12	0.0	0.0
9854. c8ooh1-3c+o2=c8ooh1-oo3-3	1.41E+13	0.0	0.0
9855. c8ooh1-3d+o2=c8ooh1-oo4-3	7.54E+12	0.0	0.0
9856. c8ooh1-3e+o2=c8ooh1-oo5-3	7.54E+12	0.0	0.0
9857. c8ooh1-3z+o2=c8ooh1-ooz-3	4.52E+12	0.0	0.0
9858. c8ooh2-3a+o2=c8ooh2-oo1-3	4.52E+12	0.0	0.0
9859. c8ooh2-3c+o2=c8ooh2-oo3-3	1.41E+13	0.0	0.0
9860. c8ooh2-3d+o2=c8ooh2-oo4-3	7.54E+12	0.0	0.0
9861. c8ooh2-3e+o2=c8ooh2-oo5-3	7.54E+12	0.0	0.0
9862. c8ooh2-3f+o2=c8ooh2-oo6-3	7.54E+12	0.0	0.0
9863. c8ooh2-3z+o2=c8ooh2-ooz-3	4.52E+12	0.0	0.0
9864. c8ooh3-3a+o2=c8ooh3-oo1-3	4.52E+12	0.0	0.0
9865. c8ooh3-3b+o2=c8ooh3-oo2-3	7.54E+12	0.0	0.0
9866. c8ooh3-3d+o2=c8ooh3-oo4-3	7.54E+12	0.0	0.0
9867. c8ooh3-3e+o2=c8ooh3-oo5-3	7.54E+12	0.0	0.0
9868. c8ooh3-3f+o2=c8ooh3-oo6-3	7.54E+12	0.0	0.0
9869. c8ooh3-3g+o2=c8ooh3-oo7-3	4.52E+12	0.0	0.0
9870. c8ooh3-3z+o2=c8ooh3-ooz-3	4.52E+12	0.0	0.0
9871. c8ooh4-3a+o2=c8ooh4-oo1-3	4.52E+12	0.0	0.0
9872. c8ooh4-3b+o2=c8ooh4-oo2-3	7.54E+12	0.0	0.0
9873. c8ooh4-3c+o2=c8ooh4-oo3-3	1.41E+13	0.0	0.0
9874. c8ooh4-3e+o2=c8ooh4-oo5-3	7.54E+12	0.0	0.0
9875. c8ooh4-3f+o2=c8ooh4-oo6-3	7.54E+12	0.0	0.0
9876. c8ooh4-3g+o2=c8ooh4-oo7-3	4.52E+12	0.0	0.0
9877. c8ooh4-3z+o2=c8ooh4-ooz-3	4.52E+12	0.0	0.0
9878. c8ooh5-3a+o2=c8ooh5-oo1-3	4.52E+12	0.0	0.0
9879. c8ooh5-3b+o2=c8ooh5-oo2-3	7.54E+12	0.0	0.0
9880. c8ooh5-3c+o2=c8ooh5-oo3-3	1.41E+13	0.0	0.0
9881. c8ooh5-3d+o2=c8ooh5-oo4-3	7.54E+12	0.0	0.0
9882. c8ooh5-3f+o2=c8ooh5-oo6-3	7.54E+12	0.0	0.0
9883. c8ooh5-3g+o2=c8ooh5-oo7-3	4.52E+12	0.0	0.0
9884. c8ooh5-3z+o2=c8ooh5-ooz-3	4.52E+12	0.0	0.0
9885. c8ooh6-3b+o2=c8ooh6-oo2-3	7.54E+12	0.0	0.0
9886. c8ooh6-3c+o2=c8ooh6-oo3-3	1.41E+13	0.0	0.0
9887. c8ooh6-3d+o2=c8ooh6-oo4-3	7.54E+12	0.0	0.0
9888. c8ooh6-3e+o2=c8ooh6-oo5-3	7.54E+12	0.0	0.0
9889. c8ooh6-3g+o2=c8ooh6-oo7-3	4.52E+12	0.0	0.0
9890. c8ooh6-3z+o2=c8ooh6-ooz-3	4.52E+12	0.0	0.0
9891. c8ooh7-3c+o2=c8ooh7-oo3-3	1.41E+13	0.0	0.0
9892. c8ooh7-3d+o2=c8ooh7-oo4-3	7.54E+12	0.0	0.0
9893. c8ooh7-3e+o2=c8ooh7-oo5-3	7.54E+12	0.0	0.0
9894. c8ooh7-3f+o2=c8ooh7-oo6-3	7.54E+12	0.0	0.0
9895. c8oohz-3a+o2=c8oohz-oo1-3	7.54E+12	0.0	0.0
9896. c8oohz-3b+o2=c8oohz-oo2-3	7.54E+12	0.0	0.0
9897. c8oohz-3c+o2=c8oohz-oo3-3	1.41E+13	0.0	0.0
9898. c8oohz-3d+o2=c8oohz-oo4-3	7.54E+12	0.0	0.0
9899. c8oohz-3e+o2=c8oohz-oo5-3	7.54E+12	0.0	0.0
9900. c8oohz-3f+o2=c8oohz-oo6-3	7.54E+12	0.0	0.0
9901. c8ooh1-oo2-3=c8ket1-2-3+oh	2.00E+11	0.0	26000.0
9902. c8ooh1-oo3-3=c8ket1-3-3+oh	2.50E+10	0.0	21000.0
9903. c8ooh1-oo4-3=c8ket1-4-3+oh	3.12E+09	0.0	18950.0
9904. c8ooh1-oo5-3=c8ket1-5-3+oh	3.90E+08	0.0	22150.0
9905. c8ooh1-ooz-3=c8ket1-z-3+oh	3.12E+09	0.0	18950.0
9906. c8ooh2-oo1-3=c8ket2-1-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9907. c8ooh2-oo3-3=c8ket2-3-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9908. c8ooh2-oo4-3=c8ket2-4-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9909. c8ooh2-oo5-3=c8ket2-5-3+oh	1.56E+09	0.0	15650.0
9910. c8ooh2-oo6-3=c8ket2-6-3+oh	1.96E+08	0.0	18650.0
9911. c8ooh2-ooz-3=c8ket2-z-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9912. c8ooh4-oo1-3=c8ket4-1-3+oh	1.56E+09	0.0	15650.0
9913. c8ooh4-oo2-3=c8ket4-2-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9914. c8ooh4-oo3-3=c8ket4-3-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9915. c8ooh4-oo5-3=c8ket4-5-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9916. c8ooh4-oo6-3=c8ket4-6-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9917. c8ooh4-oo7-3=c8ket4-7-3+oh	1.56E+09	0.0	15650.0
9918. c8ooh4-ooz-3=c8ket4-z-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9919. c8ooh5-oo1-3=c8ket5-1-3+oh	1.96E+08	0.0	18650.0
9920. c8ooh5-oo2-3=c8ket5-2-3+oh	1.56E+09	0.0	15650.0
9921. c8ooh5-oo3-3=c8ket5-3-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9922. c8ooh5-oo4-3=c8ket5-4-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9923. c8ooh5-oo6-3=c8ket5-6-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9924. c8ooh5-oo7-3=c8ket5-7-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9925. c8ooh5-ooz-3=c8ket5-z-3+oh	1.56E+09	0.0	15650.0
9926. c8ooh6-oo2-3=c8ket6-2-3+oh	1.96E+08	0.0	18650.0
9927. c8ooh6-oo3-3=c8ket6-3-3+oh	1.56E+09	0.0	15650.0
9928. c8ooh6-oo4-3=c8ket6-4-3+oh	1.25E+10	0.0	17450.0
9929. c8ooh6-oo5-3=c8ket6-5-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9930. c8ooh6-oo7-3=c8ket6-7-3+oh	1.00E+11	0.0	23450.0
9931. c8ooh6-ooz-3=c8ket6-z-3+oh	1.96E+08	0.0	18650.0
9932. c8ooh7-oo3-3=c8ket7-3-3+oh	3.91E+08	0.0	22150.0
9933. c8ooh7-oo4-3=c8ket7-4-3+oh	3.12E+09	0.0	18950.0
9934. c8ooh7-oo5-3=c8ket7-5-3+oh	2.50E+10	0.0	21000.0
9935. c8ooh7-oo6-3=c8ket7-6-3+oh	2.00E+11	0.0	26000.0
9936. c8oohz-oo1-3=c8ketz-1-3+oh	3.12E+09	0.0	18950.0
9937. c8oohz-oo2-3=c8ketz-2-3+oh	2.50E+10	0.0	21000.0
9938. c8oohz-oo3-3=c8ketz-3-3+oh	2.00E+11	0.0	26000.0
9939. c8oohz-oo4-3=c8ketz-4-3+oh	2.50E+10	0.0	21000.0
9940. c8oohz-oo5-3=c8ketz-5-3+oh	3.12E+09	0.0	18950.0
9941. c8oohz-oo6-3=c8ketz-6-3+oh	3.90E+08	0.0	22150.0
9942. c8ket1-2-3=hco+oh+ic6h13cho	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9943. c8ket1-3-3=ch2hco+oh+nc4h9coch3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9944. c8ket1-4-3=c3h6cho-1+oh+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9945. c8ket1-5-3=c4h8hco-2+oh+ethco	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9946. c8ket1-z-3=c6h12-1+hco+oh+ch2o	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9947. c8ket2-1-3=ch2o+oh+ic6h13co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9948. c8ket2-3-3=ch3co+oh+nc4h9coch3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9949. c8ket2-4-3=nc3h7hco+oh+ch3chcoch3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9950. c8ket2-5-3=ethco+oh+c3h6+ch3co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9951. c8ket2-6-3=ch3hco+oh+ch3chcoch3+c2h4	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9952. c8ket2-z-3=ch2o+oh+mvk+nc3h7	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9953. c8ket4-1-3=ch2o+oh+c3h6+c3h7co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9954. c8ket4-2-3=ch3hco+oh+nc3h7coc2h4s	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9955. c8ket4-3-3=butanone+oh+c3h7co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9956. c8ket4-5-3=ethco+oh+ic4h9co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9957. c8ket4-6-3=ch3hco+oh+ic5h11co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9958. c8ket4-7-3=ch2o+oh+ic6h13co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9959. c8ket4-z-3=ch2o+oh+nc3h7coc3h6p	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9960. c8ket5-1-3=ch2o+oh+c3h6+c2h5coch2	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9961. c8ket5-2-3=ch3hco+oh+c3h6+c2h5co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9962. c8ket5-3-3=butanone+oh+c2h5coch2	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9963. c8ket5-4-3=ic4h9cho+oh+c2h5co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9964. c8ket5-6-3=ic5h11co+oh+ch3hco	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9965. c8ket5-7-3=ic5h11coch2+oh+ch2o	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9966. c8ket5-z-3=ch2o+oh+c4h8+c2h5co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9967. c8ket6-2-3=ch3hco+oh+c3h6+ch2coch3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9968. c8ket6-3-3=butanone+oh+c2h4+ch3co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9969. c8ket6-4-3=ic4h9cho+oh+ch2coch3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9970. c8ket6-5-3=ic5h11cho+oh+ch3co	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9971. c8ket6-7-3=ic6h13co+oh+ch2o	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9972. c8ket6-z-3=ch2o+oh+c4h8+ch2coch3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9973. c8ket7-3-3=butanone+oh+c3h6cho-1	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9974. c8ket7-4-3=ic4h9cho+oh+ch2ch2hco	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9975. c8ket7-5-3=ic5h11cho+oh+ch2hco	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9976. c8ket7-6-3=ic6h13cho+oh+hco	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9977. c8ketz-1-3=ch2o+oh+hco+c6h12-1	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9978. c8ketz-2-3=ch3hco+oh+acrol+nc3h7	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9979. c8ketz-3-3=nc4h9coc2h4p+oh+ch2o	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9980. c8ketz-4-3=nc3h7hco+oh+c3h6cho-3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9981. c8ketz-5-3=ethco+oh+hco+c4h8	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9982. c8ketz-6-3=ch3hco+oh+c2h4+c3h6cho-3	1.00E+16	0.0	39000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9983. c8h16o1-2-3+oh=pc4h9+sc3h5cho+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9984. c8h16o1-2-3+oh=Bc6h13+ch2co+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9985. c8h16o1-3-3+oh=c7h14-1-2+hco+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9986. c8h16o1-3-3+oh=ch2o+c7h13-1-2+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9987. c8h16o1-4-3+oh=c6h12-2+ch2hco+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9988. c8h16o1-4-3+oh=nc3h7coc2h4s+c2h4+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9989. c8h16o1-5-3+oh=c4h8+ic3h6cho+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9990. c8h16o1-5-3+oh=c2h4+c3h6coc2h5-2+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9991. c8h16o1-z-3+oh=ch2hco+c6h12-1+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9992. c8h16o1-z-3+oh=c2h4+c5h10cho-2+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9993. c8h16o2-3-3+oh=c3h6coch3-2+c3h6+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9994. c8h16o2-3-3+oh=c2h3+nc4h9coch3+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9995. c8h16o2-4-3+oh=ch3co+c6h12-2+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9996. c8h16o2-4-3+oh=c3h7co+t2c4h8+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9997. c8h16o2-4-3+oh=c3h7co+c2c4h8+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9998. c8h16o2-5-3+oh=ch3chcoch3+c4h8+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
9999. c8h16o2-5-3+oh=c2h5coch2+t2c4h8+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10000. c8h16o2-5-3+oh=c2h5coch2+c2c4h8+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10001. c8h16o2-6-3+oh=ch3coc2h4p+t2c4h8+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10002. c8h16o2-6-3+oh=ch3coc2h4p+c2c4h8+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10003. c8h16o2-6-3+oh=c3h6coch3-2+c3h6+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10004. c8h16o2-z-3+oh=ch3co+c6h12-1+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10005. c8h16o2-z-3+oh=hco+c7h14-2+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10006. c8h16o3-4-3+oh=c3h6+c4h8cho4-2+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10007. c8h16o3-4-3+oh=c4h722+nc3h7hco+h2o	2.50E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0

```
10008. c8h16o3-5-3+oh=ethco+ic5h9+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10009. c8h16o3-5-3+oh=c2h5co+ac5h10+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10010. c8h16o3-6-3+oh=ch3co+mc6h12+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10011. c8h16o3-6-3+oh=ch2coch3+ac5h10+h2o      2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10012. c8h16o3-7-3+oh=ch2o+c7h13-1-3+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10013. c8h16o3-7-3+oh=ch2ch2hco+ac5h10+h2o     2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10014. c8h16o3-z-3+oh=nc3h7+c4h7cho1-4+h2o     2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10015. c8h16o3-z-3+oh=ch2o+c7h132-4+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10016. c8h16o4-5-3+oh=c2h5chco+sc4h9+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10017. c8h16o4-5-3+oh=ic5h11co+c2h4+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10018. c8h16o4-6-3+oh=c3h6+ic4h9co+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10019. c8h16o4-6-3+oh=ch3co+lc6h12+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10020. c8h16o4-7-3+oh=ch2hco+lc6h12+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10021. c8h16o4-7-3+oh=c2h4+ic4h9coch2+h2o      2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10022. c8h16o4-z-3+oh=c3h7co+c4h8+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10023. c8h16o4-z-3+oh=hco+c7h14-3+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10024. c8h16o5-6-3+oh=ch3chco+ac5h11+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10025. c8h16o5-6-3+oh=mvk+sc4h9+h2o            2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10026. c8h16o5-7-3+oh=hco+c7h14-5-3+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10027. c8h16o5-7-3+oh=c2h4+ic5h11co+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10028. c8h16o5-z-3+oh=c2h5coch2+c4h8+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10029. c8h16o5-z-3+oh=c3h6cho-2+c4h8+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10030. c8h16o6-7-3+oh=acrol+ac5h11+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10031. c8h16o6-7-3+oh=ch2co+lc6h13+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10032. c8h16o6-z-3+oh=ch3coc2h4p+c4h8+h2o      2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10033. c8h16o6-z-3+oh=c4h8cho4-2+c3h6+h2o      2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10034. c8h16o1-2-3+ho2=pc4h9+sc3h5cho+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10035. c8h16o1-2-3+ho2=Bc6h13+ch2co+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10036. c8h16o1-3-3+ho2=c7h14-1-2+hco+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10037. c8h16o1-3-3+ho2=ch2o+c7h13-1-2+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10038. c8h16o1-4-3+ho2=c6h12-2+ch2hco+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10039. c8h16o1-4-3+ho2=nc3h7coc2h4s+c2h4+h2o2  5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10040. c8h16o1-5-3+ho2=c4h8+ic3h6cho+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10041. c8h16o1-5-3+ho2=c2h4+c3h6coc2h5-2+h2o2  5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10042. c8h16o1-z-3+ho2=ch2hco+c6h12-1+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10043. c8h16o1-z-3+ho2=c2h4+c5h10cho-2+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10044. c8h16o2-3-3+ho2=c3h6coch3-2+c3h6+h2o2   5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10045. c8h16o2-3-3+ho2=c2h3+nc4h9coch3+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10046. c8h16o2-4-3+ho2=ch3co+c6h12-2+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10047. c8h16o2-4-3+ho2=c3h7co+t2c4h8+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10048. c8h16o2-4-3+ho2=c3h7co+c2c4h8+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10049. c8h16o2-5-3+ho2=ch3chcoch3+c4h8+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10050. c8h16o2-5-3+ho2=c2h5coch2+t2c4h8+h2o2   5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10051. c8h16o2-5-3+ho2=c2h5coch2+c2c4h8+h2o2   5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10052. c8h16o2-6-3+ho2=ch3coc2h4p+t2c4h8+h2o2  5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10053. c8h16o2-6-3+ho2=ch3coc2h4p+c2c4h8+h2o2  5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10054. c8h16o2-6-3+ho2=c3h6coch3-2+c3h6+h2o2   5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10055. c8h16o2-z-3+ho2=ch3co+c6h12-1+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10056. c8h16o2-z-3+ho2=hco+c7h14-2+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10057. c8h16o3-4-3+ho2=c3h6+c4h8cho4-2+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10058. c8h16o3-4-3+ho2=c4h722+nc3h7hco+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10059. c8h16o3-5-3+ho2=ethco+ic5h9+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10060. c8h16o3-5-3+ho2=c2h5co+ac5h10+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10061. c8h16o3-6-3+ho2=ch3co+mc6h12+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10062. c8h16o3-6-3+ho2=ch2coch3+ac5h10+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10063. c8h16o3-7-3+ho2=ch2o+c7h13-1-3+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10064. c8h16o3-7-3+ho2=ch2ch2hco+ac5h10+h2o2   5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10065. c8h16o3-z-3+ho2=nc3h7+c4h7cho1-4+h2o2   5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10066. c8h16o3-z-3+ho2=ch2o+c7h132-4+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10067. c8h16o4-5-3+ho2=c2h5chco+sc4h9+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10068. c8h16o4-5-3+ho2=ic5h11co+c2h4+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10069. c8h16o4-6-3+ho2=c3h6+ic4h9co+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10070. c8h16o4-6-3+ho2=ch3co+lc6h12+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10071. c8h16o4-7-3+ho2=ch2hco+lc6h12+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10072. c8h16o4-7-3+ho2=c2h4+ic4h9coch2+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10073. c8h16o4-z-3+ho2=c3h7co+c4h8+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10074. c8h16o4-z-3+ho2=hco+c7h14-3+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10075. c8h16o5-6-3+ho2=ch3chco+ac5h11+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10076. c8h16o5-6-3+ho2=mvk+sc4h9+h2o2          5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10077. c8h16o5-7-3+ho2=hco+c7h14-5-3+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10078. c8h16o5-7-3+ho2=c2h4+ic5h11co+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10079. c8h16o5-z-3+ho2=c2h5coch2+c4h8+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10080. c8h16o5-z-3+ho2=c3h6cho-2+c4h8+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10081. c8h16o6-7-3+ho2=acrol+ac5h11+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10082. c8h16o6-7-3+ho2=ch2co+lc6h13+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10083. c8h16o6-z-3+ho2=ch3coc2h4p+c4h8+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10084. c8h16o6-z-3+ho2=c4h8cho4-2+c3h6+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        0.00E+00    0.0        0.0
10085. c4h8cho4-2=c2h4+ch3chcho                1.03E+15   -0.6    23170.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+11    0.0     7800.0
10086. c5h10cho-2<=>c3h6+ch2ch2hco             9.38E+17   -1.3    31970.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+11    0.0     7800.0
10087. ac5h11=c3h6+c2h5                        1.03E+18   -1.2    31440.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.50E+11    0.0    10600.0
10088. ac5h11=c4h8+ch3                         1.09E+16   -0.9    29800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.50E+11    0.0     9200.0
10089. ac5h11=ac5h10+h                         4.55E+16   -0.9    36370.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+13    0.0     3200.0
10090. ac5h11+o2=ac5h10+ho2                    1.50E-19    0.0     2000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        2.00E-19    0.0    17500.0
10091. ac5h11=dc5h11                           3.00E+11    0.0    21100.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        3.00E+11    0.0    21100.0
10092. cc5h11=t2c4h8+ch3                       1.07E+15   -0.8    29360.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.50E+11    0.0     9200.0
10093. cc5h11=c2c4h8+ch3                       1.07E+15   -0.8    29360.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.50E+11    0.0     9200.0
10094. cc5h11=bc5h10+h                         8.73E+15   -0.8    35920.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+13    0.0     3200.0
10095. cc5h11=cc5h10+h                         1.48E+15   -0.6    40000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+13    0.0     2900.0
10096. cc5h11+o2=bc5h10+ho2                    1.50E-19    0.0     2000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        2.00E-19    0.0    17500.0
10097. cc5h11+o2=cc5h10+ho2                    3.00E-19    0.0     3000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        2.00E-19    0.0    17500.0
10098. dc5h11=c2h4+ic3h7                       1.14E+15   -0.4    27010.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        3.30E+11    0.0     7200.0
10099. dc5h11=cc5h10+h                         2.20E+16   -0.9    37480.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+13    0.0     2900.0
10100. dc5h11+o2=cc5h10+ho2                    3.00E-19    0.0     3000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        2.00E-19    0.0    17500.0
10101. ac5h10+oh=ic5h9+h2o                     1.00E+12    0.0     1230.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        5.00E+12    0.0    26500.0
10102. bc5h10+oh=ic5h9+h2o                     1.00E+12    0.0     1230.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        5.00E+12    0.0    26500.0
10103. cc5h10+oh=ic5h9+h2o                     1.00E+12    0.0     1230.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        5.00E+12    0.0    26500.0
10104. ac5h10+h=ic5h9+h2                       1.00E+12    0.0     3800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+12    0.0    25000.0
10105. bc5h10+h=ic5h9+h2                       1.00E+12    0.0     3800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+12    0.0    25000.0
10106. cc5h10+h=ic5h9+h2                       1.00E+12    0.0     3800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+12    0.0    25000.0
10107. ac5h10+ch3=ic5h9+ch4                    5.00E+11    0.0     7300.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        6.00E+11    0.0    25000.0
10108. bc5h10+ch3=ic5h9+ch4                    5.00E+11    0.0     7300.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        6.00E+11    0.0    25000.0
10109. cc5h10+ch3=ic5h9+ch4                    5.00E+11    0.0     7300.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        6.00E+11    0.0    25000.0
10110. ac5h10+o=ic5h9+oh                       3.70E+05    2.6    -1130.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+12    0.0    25000.0
10111. bc5h10+o=ic5h9+oh                       3.70E+05    2.6    -1130.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+12    0.0    25000.0
10112. bc5h10=ch3+c4h722                       2.50E+16    0.0    71000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+13    0.0        0.0
10113. cc5h10=ch3+c4h722                       1.00E+16    0.0    71000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+13    0.0        0.0
10114. ic5h9=ac3h4+c2h5                        1.98E+20   -1.6    59240.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        2.00E+11    0.0     8300.0
10115. ac6h13=nc3h7+c3h6                       1.76E+18   -1.3    31250.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+11    0.0     9200.0
10116. ac6h13=c5h10+ch3                        5.29E+14   -0.4    30520.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+11    0.0     9200.0
10117. ac6h13=ac6h12+h                         7.38E+16   -0.9    37100.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.60E+13    0.0     3200.0
10118. bc6h13=ic4h8+c2h5                       1.64E+17   -1.2    30950.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+11    0.0     7800.0
10119. bc6h13=ac6h12+h                         1.36E+15   -0.4    39600.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.60E+13    0.0     1200.0
10120. bc6h13=bc6h12+h                         2.79E+15   -0.5    38430.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.60E+13    0.0     2900.0
10121. cc6h13=t2c5h10+ch3                      1.03E+15   -0.7    30180.0
        Reverse Arrhenius coefficients:        1.00E+11    0.0     9200.0
```

10122. cc6h13=c2c5h10+ch3	1.03E+15	-0.7	30180.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9200.0
10123. cc6h13=bc6h12+h	1.02E+16	-0.8	36740.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.60E+13	0.0	3200.0
10124. cc6h13=cc6h12+h	4.77E+15	-0.7	37860.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.60E+13	0.0	2900.0
10125. ec6h13=ic4h9+c2h4	1.62E+18	-1.6	30400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+11	0.0	7800.0
10126. ec6h13=dc6h12+h	3.31E+16	-0.9	37950.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.60E+13	0.0	2900.0
10127. ac6h13+o2=ac6h12+ho2	1.50E-19	0.0	2000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10128. bc6h13+o2=ac6h12+ho2	9.00E-19	0.0	5020.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10129. bc6h13+o2=bc6h12+ho2	3.00E-19	0.0	3000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10130. cc6h13+o2=bc6h12+ho2	1.50E-19	0.0	2000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10131. cc6h13+o2=cc6h12+ho2	3.00E-19	0.0	3000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10132. ec6h13+o2=dc6h12+ho2	3.00E-19	0.0	3000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10133. ac6h13=ec6h13	3.00E+11	0.0	14100.0
Reverse Arrhenius coefficients:	6.00E+11	0.0	14100.0
10134. bc6h13=ec6h13	3.00E+11	0.0	21100.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	16100.0
10135. ac6h12+oh=ic6h11+h2o	3.00E+13	0.0	1230.0
Reverse Arrhenius coefficients:	9.39E+14	0.1	40080.0
10136. bc6h12+oh=ic6h11+h2o	3.00E+13	0.0	1230.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.92E+15	-0.1	37220.0
10137. cc6h12+oh=ic6h11+h2o	3.00E+13	0.0	1230.0
Reverse Arrhenius coefficients:	8.99E+14	-0.1	38640.0
10138. dc6h12+oh=ic6h11+h2o	3.00E+13	0.0	1230.0
Reverse Arrhenius coefficients:	4.21E+14	0.1	41240.0
10139. ac6h12+h=ic6h11+h2	3.70E+13	0.0	3900.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.68E+14	0.1	27600.0
10140. bc6h12+h=ic6h11+h2	3.70E+13	0.0	3900.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.48E+14	-0.1	24730.0
10141. cc6h12+h=ic6h11+h2	3.70E+13	0.0	3900.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.56E+14	-0.1	26150.0
10142. dc6h12+h=ic6h11+h2	3.70E+13	0.0	3900.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.20E+14	0.1	28750.0
10143. ac6h12+ch3=ic6h11+ch4	1.00E+12	0.0	7300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.89E+14	0.1	31480.0
10144. bc6h12+ch3=ic6h11+ch4	1.00E+12	0.0	7300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	3.87E+14	-0.1	28610.0
10145. cc6h12+ch3=ic6h11+ch4	1.00E+12	0.0	7300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.81E+14	-0.1	30030.0
10146. dc6h12+ch3=ic6h11+ch4	1.00E+12	0.0	7300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	8.48E+13	0.1	32630.0
10147. ac6h12+o=ic6h11+oh	2.20E+11	-0.1	8295.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+11	0.0	29900.0
10148. bc6h12+o=ic6h11+oh	1.08E+11	0.1	11160.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+11	0.0	29900.0
10149. cc6h12+o=ic6h11+oh	2.30E+11	0.1	9745.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+11	0.0	29900.0
10150. dc6h12+o=ic6h11+oh	4.91E+11	-0.1	7145.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+11	0.0	29900.0
10151. ic6h11=c3h6+ac3h5	2.50E+13	0.0	45000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10152. ac6h12+oh=Bc5h11+ch2o	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10153. bc6h12+oh=aceton+nc3h7	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10154. bc6h12+oh=ethco+ic3h7	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10155. cc6h12+oh=ic4h9+ch3hco	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10156. dc6h12+oh=dc5h11+ch2o	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10157. ac6h12+o=Bc5h11+hco	1.00E+11	0.0	-1050.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10158. cc6h12+o=ic4h9+ch3co	1.00E+11	0.0	-1050.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10159. dc6h12+o=dc5h11+hco	1.00E+11	0.0	-1050.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10160. ac6h12=ic4h7+c2h5	1.00E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10161. bc6h12=ch3+ic5h9	1.00E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10162. cc6h12=ch3+Bc5h9-1	1.00E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10163. dc6h12=ic3h7+ac3h5	1.00E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10164. lc6h13=c2h4+sc4h9	7.46E+14	-0.5	28020.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+11	0.0	7800.0
10165. lc6h13=lc6h12+h	7.02E+16	-0.9	44510.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.60E+13	0.0	9200.0
10166. nc6h13=mc6h12+h	2.79E+15	-0.5	38430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.60E+13	0.0	2900.0
10167. nc6h13=ac5h10+ch3	3.07E+13	-0.2	30130.0
Reverse Arrhenius coefficients:	8.50E+10	0.0	7800.0
10168. nc6h13=nc6h12+h	4.84E+14	-0.3	41690.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.60E+13	0.0	3200.0
10169. lc6h13+o2=lc6h12+ho2	2.00E-18	0.0	5000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10170. nc6h13+o2=mc6h12+ho2	2.00E-18	0.0	5000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10171. nc6h13+o2=nc6h12+ho2	2.00E-18	0.0	5000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E-19	0.0	17500.0
10172. lc6h12+oh=c6h11-3+h2o	3.00E+13	0.0	1230.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.64E+14	0.0	38600.0
10173. mc6h12+oh=c6h11-3+h2o	3.00E+13	0.0	1230.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.65E+15	-0.2	34320.0
10174. nc6h12+oh=c6h11-3+h2o	3.00E+13	0.0	1230.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.86E+14	0.0	37280.0
10175. lc6h12+h=c6h11-3+h2	3.70E+13	0.0	4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.18E+14	0.0	26220.0
10176. mc6h12+h=c6h11-3+h2	3.70E+13	0.0	4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	4.69E+14	-0.2	21940.0
10177. nc6h12+h=c6h11-3+h2	3.70E+13	0.0	4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	8.14E+13	0.0	24900.0
10178. lc6h12+ch3=c6h11-3+ch4	1.00E+12	0.0	7300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.54E+14	0.0	30000.0
10179. mc6h12+ch3=c6h11-3+ch4	1.00E+12	0.0	7300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	3.31E+14	-0.2	25720.0
10180. nc6h12+ch3=c6h11-3+ch4	1.00E+12	0.0	7300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.75E+13	0.0	28680.0
10181. lc6h12+o=c6h11-3+oh	2.71E+11	0.0	9775.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+11	0.0	29900.0
10182. mc6h12+o=c6h11-3+oh	1.26E+11	0.2	14060.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+11	0.0	29900.0
10183. nc6h12+o=c6h11-3+oh	7.24E+11	0.0	11100.0
Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+11	0.0	29900.0
10184. lc6h12+oh=ac5h11+ch2o	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10185. mc6h12+oh=sc4h9+ch3hco	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10186. nc6h12+oh=Cc5h11+ch2o	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10187. lc6h12+o=ac5h11+hco	1.00E+11	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10188. mc6h12+o=sc4h9+ch3co	1.00E+11	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10189. nc6h12+o=Cc5h11+hco	1.00E+11	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10190. lc6h12=c2h5+Ac4h7-1	1.00E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10191. mc6h12=ch3+ic5h9	1.00E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10192. nc6h12=ch3+ic5h9	1.00E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10193. c6h11-3=c4h8+c2h3	2.50E+13	0.0	45000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10194. nc3h7coc2h4s<=>ch3chco+nc3h7	1.97E+19	-1.5	42860.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	10600.0
10195. ic4h9cho+o2=ic4h9co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+07	0.0	40000.0
10196. ic4h9cho+oh=ic4h9co+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.74E+10	0.8	31200.0
10197. ic4h9cho+h=ic4h9co+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.80E+13	0.0	24000.0
10198. ic4h9cho+o=ic4h9co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+12	0.0	19000.0
10199. ic4h9cho+ho2=ic4h9co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+12	0.0	10000.0
10200. ic4h9cho+ch3=ic4h9co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+13	0.0	28000.0
10201. ic4h9cho+ch3o=ic4h9co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
Reverse Arrhenius coefficients:	3.00E+11	0.0	18000.0
10202. ic4h9cho+ch3o2=ic4h9co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	10000.0
10203. ic4h9co=ic4h9+co	1.00E+11	0.0	9600.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	0.0
10204. ic5h11cho+o2=ic5h11co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+07	0.0	40000.0
10205. ic5h11cho+oh=ic5h11co+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.74E+10	0.8	31200.0
10206. ic5h11cho+h=ic5h11co+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.80E+13	0.0	24000.0
10207. ic5h11cho+o=ic5h11co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+12	0.0	19000.0
10208. ic5h11cho+ho2=ic5h11co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+12	0.0	10000.0
10209. ic5h11cho+ch3=ic5h11co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+13	0.0	28000.0
10210. ic5h11cho+ch3o=ic5h11co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
Reverse Arrhenius coefficients:	3.00E+11	0.0	18000.0
10211. ic5h11cho+ch3o2=ic5h11co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	10000.0
10212. ic5h11co=dc5h11+co	1.00E+11	0.0	9600.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	0.0
10213. ic6h13cho+o2=ic6h13co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+07	0.0	40000.0
10214. ic6h13cho+oh=ic6h13co+h2o	2.69E+10	0.8	-340.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.74E+10	0.8	31200.0
10215. ic6h13cho+h=ic6h13co+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.80E+13	0.0	24000.0
10216. ic6h13cho+o=ic6h13co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+12	0.0	19000.0
10217. ic6h13cho+ho2=ic6h13co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+12	0.0	10000.0
10218. ic6h13cho+ch3=ic6h13co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+13	0.0	28000.0
10219. ic6h13cho+ch3o=ic6h13co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
Reverse Arrhenius coefficients:	3.00E+11	0.0	18000.0
10220. ic6h13cho+ch3o2=ic6h13co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	10000.0
10221. ic6h13co=ec6h13+co	1.00E+11	0.0	9600.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	0.0
10222. nc3h7coc3h6p=nc3h7coch2+c2h4	5.00E+17	-1.5	26000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+11	0.0	7800.0
10223. c3h6coc2h5-2<=>c3h6+c2h5co	4.05E+16	-1.1	26150.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	8300.0
10224. ic5h11coch2=cc5h11+ch2co	2.00E+13	0.0	31000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E+11	0.0	7350.0
10225. c7h132-4+ho2<=>c7h13o2-4+oh	9.64E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	4.27E+15	-1.0	15430.0
10226. c7h132-4+ch3o2<=>c7h13o2-4+ch3o	9.64E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	4.17E+17	-1.6	20190.0
10227. c7h132-4+c2h5o2<=>c7h13o2-4+c2h5o	9.64E+12	0.0	0.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.73E+14	-0.7	18030.0
10228. c7h13o2-4<=>sc3h5cho+nc3h7	6.32E+19	-1.9	11130.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10229. c7h13o2-4<=>nc3h7hco+sc3h5	1.01E+22	-2.5	29190.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10230. ic4h9coch2=pc4h9+ch2co	2.00E+13	0.0	31000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E+11	0.0	7350.0
10231. c7h14-1-2+oh=c7h13-1-2+h2o	3.28E+08	1.6	-35.0
10232. c7h14-1-2+ho2=c7h13-1-2+h2o2	4.42E+02	3.4	13720.0
10233. c7h14-1-2+h=c7h13-1-2+h2	9.10E+06	2.4	4471.0
10234. c7h14-1-2+ch3=c7h13-1-2+ch4	1.06E+01	3.5	5481.0
10235. c7h14-1-2+o=c7h13-1-2+oh	3.86E+06	2.5	2830.0
10236. c7h14-1-2+oh=ch2o+Bc6h13	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10237. c7h14-1-2+oh=aceton+pc4h9	1.00E+11	0.0	-4000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10238. c7h14-1-2+o=ch2o+c6h12-2	1.00E+11	0.0	-1050.0

Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10239. c7h14-1-2+o=aceton+c4h8	1.00E+11	0.0	-1050.0
Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10240. c7h14-1-2=ic4h7+nc3h7	2.50E+16	0.0	71000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10241. c7h14-1-2=c4h8+c3h6	3.98E+12	0.0	57629.0
10242. c7h13-1-2+ho2<=>ac3h5hco+nc3h7+oh	9.64E+12	0.0	0.0
10243. c7h13-1-2+ch3o2<=>ac3h5hco+nc3h7+ch3o	9.64E+12	0.0	0.0
10244. c7h13-1-2+c2h5o2<=>ac3h5hco+nc3h7+c2h5o	9.64E+12	0.0	0.0
10245. c7h13-1-2=c3h6+Dc4h7-1	2.50E+13	0.0	30000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10246. c7h13-1-2=ic4h8+ac3h5	2.50E+13	0.0	25000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10247. c7h13-1-2=cc5h10+c2h3	2.50E+13	0.0	35000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10248. c7h13-1-2=tc3h5+c4h8	2.50E+13	0.0	30000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10249. c7h13-1-2=ic4h7+c3h6	2.50E+13	0.0	30000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10250. c7h13-1-2=ic5h9+c2h4	2.50E+13	0.0	30000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10251. c8h17-2a+h=c8h18-2	1.00E+14	0.0	0.0
10252. c8h17-2b+h=c8h18-2	1.00E+14	0.0	0.0
10253. c8h17-2c+h=c8h18-2	1.00E+14	0.0	0.0
10254. c8h17-2d+h=c8h18-2	1.00E+14	0.0	0.0
10255. c8h17-2e+h=c8h18-2	1.00E+14	0.0	0.0
10256. c8h17-2f+h=c8h18-2	1.00E+14	0.0	0.0
10257. c8h17-2g+h=c8h18-2	1.00E+14	0.0	0.0
10258. ch3+Bc7h15=c8h18-2	1.00E+13	0.0	0.0
10259. ic3h7+Ac5h11=c8h18-2	8.00E+12	0.0	0.0
10260. ic4h9+pc4h9=c8h18-2	8.00E+12	0.0	0.0
10261. dc5h11+nc3h7=c8h18-2	8.00E+12	0.0	0.0
10262. ec6h13+c2h5=c8h18-2	8.00E+12	0.0	0.0
10263. c7h15-2f+ch3=c8h18-2	1.00E+13	0.0	0.0
10264. c8h18-2+h=c8h17-2a+h2	1.33E+06	2.5	6756.0
10265. c8h18-2+h=c8h17-2b+h2	6.02E+05	2.4	2583.0
10266. c8h18-2+h=c8h17-2c+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
10267. c8h18-2+h=c8h17-2d+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
10268. c8h18-2+h=c8h17-2e+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
10269. c8h18-2+h=c8h17-2f+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
10270. c8h18-2+h=c8h17-2g+h2	6.66E+05	2.5	6756.0
10271. c8h18-2+o=c8h17-2a+oh	1.96E+06	2.4	4750.0
10272. c8h18-2+o=c8h17-2b+oh	3.83E+05	2.4	1140.0
10273. c8h18-2+o=c8h17-2c+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
10274. c8h18-2+o=c8h17-2d+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
10275. c8h18-2+o=c8h17-2e+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
10276. c8h18-2+o=c8h17-2f+oh	5.52E+05	2.5	2830.0
10277. c8h18-2+o=c8h17-2g+oh	9.81E+05	2.4	4750.0
10278. c8h18-2+oh=c8h17-2a+h2o	1.06E+10	1.0	1590.0
10279. c8h18-2+oh=c8h17-2b+h2o	5.73E+10	0.5	63.0
10280. c8h18-2+oh=c8h17-2c+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
10281. c8h18-2+oh=c8h17-2d+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
10282. c8h18-2+oh=c8h17-2e+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
10283. c8h18-2+oh=c8h17-2f+h2o	4.68E+07	1.6	-35.0
10284. c8h18-2+oh=c8h17-2g+h2o	5.28E+09	1.0	1590.0
10285. c8h18-2+ch3=c8h17-2a+ch4	9.04E-01	3.6	7154.0
10286. c8h18-2+ch3=c8h17-2b+ch4	6.01E-10	6.4	893.0
10287. c8h18-2+ch3=c8h17-2c+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
10288. c8h18-2+ch3=c8h17-2d+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
10289. c8h18-2+ch3=c8h17-2e+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
10290. c8h18-2+ch3=c8h17-2f+ch4	1.51E+00	3.5	5481.0
10291. c8h18-2+ch3=c8h17-2g+ch4	4.52E-01	3.6	7154.0
10292. c8h18-2+ho2=c8h17-2a+h2o2	4.08E+01	3.6	17160.0
10293. c8h18-2+ho2=c8h17-2b+h2o2	6.50E+02	3.0	12090.0
10294. c8h18-2+ho2=c8h17-2c+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
10295. c8h18-2+ho2=c8h17-2d+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
10296. c8h18-2+ho2=c8h17-2e+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
10297. c8h18-2+ho2=c8h17-2f+h2o2	6.32E+01	3.4	13720.0
10298. c8h18-2+ho2=c8h17-2g+h2o2	2.04E+01	3.6	17160.0
10299. c8h18-2+ch3o=c8h17-2a+ch3oh	4.34E+11	0.0	6548.0
10300. c8h18-2+ch3o=c8h17-2b+ch3oh	2.29E+10	0.0	2873.0
10301. c8h18-2+ch3o=c8h17-2c+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
10302. c8h18-2+ch3o=c8h17-2d+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
10303. c8h18-2+ch3o=c8h17-2e+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
10304. c8h18-2+ch3o=c8h17-2f+ch3oh	1.45E+11	0.0	4571.0
10305. c8h18-2+ch3o=c8h17-2g+ch3oh	2.17E+11	0.0	6548.0
10306. c8h18-2+o2=c8h17-2a+ho2	6.00E+13	0.0	52290.0
10307. c8h18-2+o2=c8h17-2b+ho2	1.00E+13	0.0	48200.0
10308. c8h18-2+o2=c8h17-2c+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
10309. c8h18-2+o2=c8h17-2d+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
10310. c8h18-2+o2=c8h17-2e+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
10311. c8h18-2+o2=c8h17-2f+ho2	2.00E+13	0.0	49640.0
10312. c8h18-2+o2=c8h17-2g+ho2	3.00E+13	0.0	52800.0
10313. c8h18-2+c2h5=c8h17-2a+c2h6	1.00E+11	0.0	13400.0
10314. c8h18-2+c2h5=c8h17-2b+c2h6	1.00E+11	0.0	7900.0
10315. c8h18-2+c2h5=c8h17-2c+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
10316. c8h18-2+c2h5=c8h17-2d+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
10317. c8h18-2+c2h5=c8h17-2e+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
10318. c8h18-2+c2h5=c8h17-2f+c2h6	5.00E+10	0.0	10400.0
10319. c8h18-2+c2h5=c8h17-2g+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
10320. c8h18-2+c2h3=c8h17-2a+c2h4	1.00E+12	0.0	18000.0
10321. c8h18-2+c2h3=c8h17-2b+c2h4	2.00E+11	0.0	14300.0
10322. c8h18-2+c2h3=c8h17-2c+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
10323. c8h18-2+c2h3=c8h17-2d+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
10324. c8h18-2+c2h3=c8h17-2e+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
10325. c8h18-2+c2h3=c8h17-2f+c2h4	4.00E+11	0.0	16800.0
10326. c8h18-2+c2h3=c8h17-2g+c2h4	5.00E+11	0.0	18000.0
10327. c8h18-2+ch3o2=c8h17-2a+ch3o2h	1.39E+00	4.0	18280.0
10328. c8h18-2+ch3o2=c8h17-2b+ch3o2h	2.06E+02	3.1	13190.0
10329. c8h18-2+ch3o2=c8h17-2c+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
10330. c8h18-2+ch3o2=c8h17-2d+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
10331. c8h18-2+ch3o2=c8h17-2e+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
10332. c8h18-2+ch3o2=c8h17-2f+ch3o2h	1.02E+01	3.6	14810.0
10333. c8h18-2+ch3o2=c8h17-2g+ch3o2h	6.93E-01	4.0	18280.0
10334. c8h18-2+c8h17-2a=c8h17-2b+c8h18-2	2.50E+10	0.0	7900.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	12300.0
10335. c8h18-2+c8h17-2a=c8h17-2c+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	12300.0
10336. c8h18-2+c8h17-2a=c8h17-2d+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	12300.0
10337. c8h18-2+c8h17-2a=c8h17-2e+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	12300.0
10338. c8h18-2+c8h17-2a=c8h17-2f+c8h18-2	5.00E+10	0.0	12300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	10400.0
10339. c8h18-2+c8h17-2a=c8h17-2g+c8h18-2	7.50E+10	0.0	12300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.50E+11	0.0	12300.0
10340. c8h18-2+c8h17-2b=c8h17-2c+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
10341. c8h18-2+c8h17-2b=c8h17-2d+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
10342. c8h18-2+c8h17-2b=c8h17-2e+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
10343. c8h18-2+c8h17-2b=c8h17-2f+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
10344. c8h18-2+c8h17-2b=c8h17-2g+c8h18-2	7.50E+10	0.0	12300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.50E+10	0.0	7900.0
10345. c8h18-2+c8h17-2c=c8h17-2d+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10346. c8h18-2+c8h17-2c=c8h17-2e+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10347. c8h18-2+c8h17-2c=c8h17-2f+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10348. c8h18-2+c8h17-2c=c8h17-2g+c8h18-2	7.50E+10	0.0	12300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10349. c8h18-2+c8h17-2d=c8h17-2e+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10350. c8h18-2+c8h17-2d=c8h17-2f+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10351. c8h18-2+c8h17-2d=c8h17-2g+c8h18-2	7.50E+10	0.0	12300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10352. c8h18-2+c8h17-2e=c8h17-2f+c8h18-2	5.00E+10	0.0	10400.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10353. c8h18-2+c8h17-2e=c8h17-2g+c8h18-2	7.50E+10	0.0	12300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10354. c8h18-2+c8h17-2f=c8h17-2g+c8h18-2	7.50E+10	0.0	12300.0
Reverse Arrhenius coefficients:	5.00E+10	0.0	10400.0
10355. c8h18-2+c8h17oo-1-2=c8h17-2a+c8h17ooh-1-2	1.20E+13	0.0	20430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10356. c8h18-2+c8h17oo-2-2=c8h17-2a+c8h17ooh-2-2	1.20E+13	0.0	20430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10357. c8h18-2+c8h17oo-3-2=c8h17-2a+c8h17ooh-3-2	1.20E+13	0.0	20430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10358. c8h18-2+c8h17oo-4-2=c8h17-2a+c8h17ooh-4-2	1.20E+13	0.0	20430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10359. c8h18-2+c8h17oo-5-2=c8h17-2a+c8h17ooh-5-2	1.20E+13	0.0	20430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10360. c8h18-2+c8h17oo-6-2=c8h17-2a+c8h17ooh-6-2	1.20E+13	0.0	20430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10361. c8h18-2+c8h17oo-7-2=c8h17-2a+c8h17ooh-7-2	1.20E+13	0.0	20430.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10362. c8h18-2+c8h17oo-1-2=c8h17-2b+c8h17ooh-1-2	2.00E+12	0.0	16000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10363. c8h18-2+c8h17oo-2-2=c8h17-2b+c8h17ooh-2-2	2.00E+12	0.0	16000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10364. c8h18-2+c8h17oo-3-2=c8h17-2b+c8h17ooh-3-2	2.00E+12	0.0	16000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10365. c8h18-2+c8h17oo-4-2=c8h17-2b+c8h17ooh-4-2	2.00E+12	0.0	16000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10366. c8h18-2+c8h17oo-5-2=c8h17-2b+c8h17ooh-5-2	2.00E+12	0.0	16000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10367. c8h18-2+c8h17oo-6-2=c8h17-2b+c8h17ooh-6-2	2.00E+12	0.0	16000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10368. c8h18-2+c8h17oo-7-2=c8h17-2b+c8h17ooh-7-2	2.00E+12	0.0	16000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10369. c8h18-2+c8h17oo-1-2=c8h17-2c+c8h17ooh-1-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10370. c8h18-2+c8h17oo-2-2=c8h17-2c+c8h17ooh-2-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10371. c8h18-2+c8h17oo-3-2=c8h17-2c+c8h17ooh-3-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10372. c8h18-2+c8h17oo-4-2=c8h17-2c+c8h17ooh-4-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10373. c8h18-2+c8h17oo-5-2=c8h17-2c+c8h17ooh-5-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10374. c8h18-2+c8h17oo-6-2=c8h17-2c+c8h17ooh-6-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10375. c8h18-2+c8h17oo-7-2=c8h17-2c+c8h17ooh-7-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10376. c8h18-2+c8h17oo-1-2=c8h17-2d+c8h17ooh-1-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10377. c8h18-2+c8h17oo-2-2=c8h17-2d+c8h17ooh-2-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10378. c8h18-2+c8h17oo-3-2=c8h17-2d+c8h17ooh-3-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10379. c8h18-2+c8h17oo-4-2=c8h17-2d+c8h17ooh-4-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10380. c8h18-2+c8h17oo-5-2=c8h17-2d+c8h17ooh-5-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10381. c8h18-2+c8h17oo-6-2=c8h17-2d+c8h17ooh-6-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10382. c8h18-2+c8h17oo-7-2=c8h17-2d+c8h17ooh-7-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10383. c8h18-2+c8h17oo-1-2=c8h17-2e+c8h17ooh-1-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10384. c8h18-2+c8h17oo-2-2=c8h17-2e+c8h17ooh-2-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10385. c8h18-2+c8h17oo-3-2=c8h17-2e+c8h17ooh-3-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10386. c8h18-2+c8h17oo-4-2=c8h17-2e+c8h17ooh-4-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10387. c8h18-2+c8h17oo-5-2=c8h17-2e+c8h17ooh-5-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10388. c8h18-2+c8h17oo-6-2=c8h17-2e+c8h17ooh-6-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10389. c8h18-2+c8h17oo-7-2=c8h17-2e+c8h17ooh-7-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10390. c8h18-2+c8h17oo-1-2=c8h17-2f+c8h17ooh-1-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10391. c8h18-2+c8h17oo-2-2=c8h17-2f+c8h17ooh-2-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10392. c8h18-2+c8h17oo-3-2=c8h17-2f+c8h17ooh-3-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10393. c8h18-2+c8h17oo-4-2=c8h17-2f+c8h17ooh-4-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10394. c8h18-2+c8h17oo-5-2=c8h17-2f+c8h17ooh-5-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10395. c8h18-2+c8h17oo-6-2=c8h17-2f+c8h17ooh-6-2	4.00E+12	0.0	17700.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0

10396.	c8h18-2+c8h17oo-7-2=c8h17-2f+c8h17ooh-7-2	4.00E+12	0.0	17700.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10397.	c8h18-2+c8h17oo-1-2=c8h17-2g+c8h17ooh-1-2	6.00E+12	0.0	20430.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10398.	c8h18-2+c8h17oo-2-2=c8h17-2g+c8h17ooh-2-2	6.00E+12	0.0	20430.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10399.	c8h18-2+c8h17oo-3-2=c8h17-2g+c8h17ooh-3-2	6.00E+12	0.0	20430.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10400.	c8h18-2+c8h17oo-4-2=c8h17-2g+c8h17ooh-4-2	6.00E+12	0.0	20430.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10401.	c8h18-2+c8h17oo-5-2=c8h17-2g+c8h17ooh-5-2	6.00E+12	0.0	20430.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10402.	c8h18-2+c8h17oo-6-2=c8h17-2g+c8h17ooh-6-2	6.00E+12	0.0	20430.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+10	0.0	15000.0
10403.	c8h18-2+c8h17oo-7-2=c8h17-2g+c8h17ooh-7-2	6.00E+12	0.0	20430.0
10404.	c8h17-2a=Ac5h11+c3h6	3.68E+15	-0.6	31359.0
10405.	c8h17-2a=ch3+c7h14-1	9.55E+14	-0.6	30592.0
10406.	h+c8h16-1-2=c8h17-2a	2.50E+11	0.5	2620.0
10407.	c8h17-2b=pc4h9+ic4h8	1.71E+12	0.3	26610.0
10408.	h+c8h16-1-2=c8h17-2b	4.24E+11	0.5	1230.0
10409.	h+c8h16-2-2=c8h17-2b	2.50E+11	0.5	2620.0
10410.	c8h17-2c=nc3h7+cc5h10	3.08E+13	0.0	28992.0
10411.	c8h17-2c=ch3+c7h14-2	1.77E+13	0.1	30542.0
10412.	h+c8h16-2-2=c8h17-2c	2.50E+11	0.5	2620.0
10413.	h+c8h16-3-2=c8h17-2c	2.50E+11	0.5	2620.0
10414.	c8h17-2d=ic3h7+c5h10	6.98E+12	0.2	24963.0
10415.	c8h17-2d=c2h5+dc6h12	3.08E+13	0.0	28992.0
10416.	h+c8h16-3-2=c8h17-2d	2.50E+11	0.5	2620.0
10417.	h+c8h16-4-2=c8h17-2d	2.50E+11	0.5	2620.0
10418.	c8h17-2e=ic4h9+c4h8	6.98E+12	0.2	24963.0
10419.	c8h17-2e=ch3+c7h14-5-2	5.50E+13	-0.6	30592.0
10420.	h+c8h16-4-2=c8h17-2e	2.50E+11	0.5	2620.0
10421.	h+c8h16-5-2=c8h17-2e	2.50E+11	0.5	2620.0
10422.	c8h17-2f=dc5h11+c3h6	1.06E+13	0.1	27125.0
10423.	h+c8h16-5-2=c8h17-2f	2.50E+11	0.5	2620.0
10424.	h+c8h16-6-2=c8h17-2f	2.50E+11	0.5	2620.0
10425.	c8h17-2g=ec6h13+c2h4	2.64E+15	-0.6	31136.0
10426.	h+c8h16-6-2=c8h17-2g	2.50E+11	0.5	2620.0
10427.	c8h17-2a=c8h17-2d	6.92E+00	3.2	16558.0
10428.	c8h17-2a=c8h17-2e	1.82E+02	2.5	10960.0
10429.	c8h17-2a=c8h17-2f	2.96E+00	3.1	11020.0
10430.	c8h17-2b=c8h17-2e	1.27E+01	3.1	17440.0
10431.	c8h17-2b=c8h17-2f	4.11E+02	2.4	11500.0
10432.	c8h17-2b=c8h17-2g	4.05E+00	2.5	13800.0
10433.	c8h17-2c=c8h17-2f	1.42E+00	3.3	16140.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.42E+00	3.3	16140.0
10434.	c8h17-2g=c8h17-2c	1.82E+02	2.5	10960.0
10435.	c8h17-2g=c8h17-2d	6.92E+00	3.2	16558.0
10436.	c8h16-1-2+oh=c8h15-1-2+h2o	3.74E+08	1.6	-35.0
10437.	c8h16-2-2+oh=c8h15-1-2+h2o	3.74E+08	1.6	-35.0
10438.	c8h16-3-2+oh=c8h15-1-2+h2o	3.74E+08	1.6	-35.0
10439.	c8h16-4-2+oh=c8h15-1-2+h2o	3.74E+08	1.6	-35.0
10440.	c8h16-5-2+oh=c8h15-1-2+h2o	3.74E+08	1.6	-35.0
10441.	c8h16-6-2+oh=c8h15-1-2+h2o	3.74E+08	1.6	-35.0
10442.	c8h16-1-2+ho2=c8h15-1-2+h2o2	5.06E+02	3.4	13720.0
10443.	c8h16-2-2+ho2=c8h15-1-2+h2o2	5.06E+02	3.4	13720.0
10444.	c8h16-3-2+ho2=c8h15-1-2+h2o2	5.06E+02	3.4	13720.0
10445.	c8h16-4-2+ho2=c8h15-1-2+h2o2	5.06E+02	3.4	13720.0
10446.	c8h16-5-2+ho2=c8h15-1-2+h2o2	5.06E+02	3.4	13720.0
10447.	c8h16-6-2+ho2=c8h15-1-2+h2o2	5.06E+02	3.4	13720.0
10448.	c8h16-1-2+h=c8h15-1-2+h2	1.04E+07	2.4	4471.0
10449.	c8h16-2-2+h=c8h15-1-2+h2	1.04E+07	2.4	4471.0
10450.	c8h16-3-2+h=c8h15-1-2+h2	1.04E+07	2.4	4471.0
10451.	c8h16-4-2+h=c8h15-1-2+h2	1.04E+07	2.4	4471.0
10452.	c8h16-5-2+h=c8h15-1-2+h2	1.04E+07	2.4	4471.0
10453.	c8h16-6-2+h=c8h15-1-2+h2	1.04E+07	2.4	4471.0
10454.	c8h16-1-2+ch3=c8h15-1-2+ch4	1.21E+01	3.5	5481.0
10455.	c8h16-2-2+ch3=c8h15-1-2+ch4	1.21E+01	3.5	5481.0
10456.	c8h16-3-2+ch3=c8h15-1-2+ch4	1.21E+01	3.5	5481.0
10457.	c8h16-4-2+ch3=c8h15-1-2+ch4	1.21E+01	3.5	5481.0
10458.	c8h16-5-2+ch3=c8h15-1-2+ch4	1.21E+01	3.5	5481.0
10459.	c8h16-6-2+ch3=c8h15-1-2+ch4	1.21E+01	3.5	5481.0
10460.	c8h16-1-2+o=c8h15-1-2+oh	4.42E+06	2.5	2830.0
10461.	c8h16-2-2+o=c8h15-1-2+oh	4.42E+06	2.5	2830.0
10462.	c8h16-3-2+o=c8h15-1-2+oh	4.42E+06	2.5	2830.0
10463.	c8h16-4-2+o=c8h15-1-2+oh	4.42E+06	2.5	2830.0
10464.	c8h16-5-2+o=c8h15-1-2+oh	4.42E+06	2.5	2830.0
10465.	c8h16-6-2+o=c8h15-1-2+oh	4.42E+06	2.5	2830.0
10466.	c8h16-1-2+oh=ch2o+Bc7h15	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10467.	c8h16-1-2+oh=aceton+Ac5h11	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10468.	c8h16-2-2+oh=aceton+Ac5h11	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10469.	c8h16-3-2+oh=nc3h7hco+ic4h9	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10470.	c8h16-4-2+oh=nc3h7hco+ic4h9	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10471.	c8h16-4-2+oh=ethco+dc5h11	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10472.	c8h16-5-2+oh=ethco+dc5h11	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10473.	c8h16-5-2+oh=ch3hco+ec6h13	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10474.	c8h16-6-2+oh=ch3hco+ec6h13	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10475.	c8h16-6-2+oh=ch2o+c7h15-2f	1.00E+11	0.0	-4000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10476.	c8h16-1-2+o=ch2o+c7h14-2	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10477.	c8h16-1-2+o=aceton+c5h10	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10478.	c8h16-2-2+o=aceton+c5h10	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10479.	c8h16-3-2+o=nc3h7hco+ic4h8	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10480.	c8h16-4-2+o=nc3h7hco+ic4h8	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10481.	c8h16-4-2+o=ethco+cc5h10	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10482.	c8h16-5-2+o=ethco+cc5h10	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10483.	c8h16-5-2+o=ch3hco+dc6h12	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10484.	c8h16-6-2+o=ch3hco+dc6h12	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10485.	c8h16-6-2+o=ch2o+c7h14-5-2	1.00E+11	0.0	-1050.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0.0
10486.	c8h15-1-2+ho2<=>ac3h5hco+pc4h9+oh	9.64E+12	0.0	0.0
10487.	c8h15-1-2+ch3o2<=>ac3h5hco+pc4h9+ch3o	9.64E+12	0.0	0.0
10488.	c8h15-1-2+c2h5o2<=>ac3h5hco+pc4h9+c2h5o	9.64E+12	0.0	0.0
10489.	c8h15-1-2=c3h6+Bc5h9-1	2.50E+13	0.0	30000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10490.	c8h15-1-2=ic4h8+Dc4h7-1	2.50E+13	0.0	30000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10491.	c8h15-1-2=cc5h10+ac3h5	2.50E+13	0.0	25000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10492.	c8h15-1-2=dc6h12+c2h3	2.50E+13	0.0	35000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10493.	c8h15-1-2=tc3h5+c5h10	2.50E+13	0.0	25000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10494.	c8h15-1-2=ic4h7+c4h8	2.50E+13	0.0	30000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10495.	c8h15-1-2=ic5h9+c3h6	2.50E+13	0.0	30000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10496.	c8h15-1-2=ic6h11+c2h4	2.50E+13	0.0	30000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	9600.0
10497.	c8h16-1-2=ic4h7+pc4h9	2.50E+16	0.0	71000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10498.	c8h16-2-2=ic5h9+nc3h7	2.50E+16	0.0	71000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10499.	c8h16-3-2=ic6h11+c2h5	2.50E+16	0.0	71000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10500.	c8h16-4-2=c7h13-1-2+ch3	2.50E+16	0.0	71000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10501.	c8h16-4-2=ic3h7+Ec5h9-1	2.50E+16	0.0	71000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10502.	c8h16-5-2=ic4h7+pc4h9	2.50E+16	0.0	71000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10503.	c8h16-6-2=ic5h9+nc3h7	2.50E+16	0.0	71000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+13	0.0	0.0
10504.	c8h16-1-2=c5h10+c3h6	3.98E+12	0.0	57629.0
10505.	c8h16-2-2=c3h6+cc5h10	3.98E+12	0.0	57629.0
10506.	c8h16-3-2=c2h4+dc6h12	3.98E+12	0.0	57629.0
10507.	c8h16-4-2=c5h10+c3h6	3.98E+12	0.0	57629.0
10508.	c7h14-5-2=c3h6+ic4h8	3.98E+12	0.0	57629.0
10509.	c8h16-5-2=c4h8+ic4h8	3.98E+12	0.0	57629.0
10510.	c8h16-6-2=c3h6+cc5h10	3.98E+12	0.0	57629.0
10511.	c8h17-2a+o2=c8h17oo-1-2	4.52E+12	0.0	0.0
10512.	c8h17-2b+o2=c8h17oo-2-2	1.41E+13	0.0	0.0
10513.	c8h17-2c+o2=c8h17oo-3-2	7.54E+12	0.0	0.0
10514.	c8h17-2d+o2=c8h17oo-4-2	7.54E+12	0.0	0.0
10515.	c8h17-2e+o2=c8h17oo-5-2	7.54E+12	0.0	0.0
10516.	c8h17-2f+o2=c8h17oo-6-2	7.54E+12	0.0	0.0
10517.	c8h17-2g+o2=c8h17oo-7-2	4.52E+12	0.0	0.0
10518.	c8h17-2a+c8h17oo-1-2=c8h17o-1-2+c8h17o-1-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10519.	c8h17-2a+c8h17oo-2-2=c8h17o-1-2+c8h17o-2-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10520.	c8h17-2a+c8h17oo-3-2=c8h17o-1-2+c8h17o-3-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10521.	c8h17-2a+c8h17oo-4-2=c8h17o-1-2+c8h17o-4-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10522.	c8h17-2a+c8h17oo-5-2=c8h17o-1-2+c8h17o-5-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10523.	c8h17-2a+c8h17oo-6-2=c8h17o-1-2+c8h17o-6-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10524.	c8h17-2a+c8h17oo-7-2=c8h17o-1-2+c8h17o-7-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10525.	c8h17-2b+c8h17oo-1-2=c8h17o-2-2+c8h17o-1-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10526.	c8h17-2b+c8h17oo-2-2=c8h17o-2-2+c8h17o-2-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10527.	c8h17-2b+c8h17oo-3-2=c8h17o-2-2+c8h17o-3-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10528.	c8h17-2b+c8h17oo-4-2=c8h17o-2-2+c8h17o-4-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10529.	c8h17-2b+c8h17oo-5-2=c8h17o-2-2+c8h17o-5-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10530.	c8h17-2b+c8h17oo-6-2=c8h17o-2-2+c8h17o-6-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10531.	c8h17-2b+c8h17oo-7-2=c8h17o-2-2+c8h17o-7-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10532.	c8h17-2c+c8h17oo-1-2=c8h17o-3-2+c8h17o-1-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10533.	c8h17-2c+c8h17oo-2-2=c8h17o-3-2+c8h17o-2-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10534.	c8h17-2c+c8h17oo-3-2=c8h17o-3-2+c8h17o-3-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10535.	c8h17-2c+c8h17oo-4-2=c8h17o-3-2+c8h17o-4-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10536.	c8h17-2c+c8h17oo-5-2=c8h17o-3-2+c8h17o-5-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10537.	c8h17-2c+c8h17oo-6-2=c8h17o-3-2+c8h17o-6-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10538.	c8h17-2c+c8h17oo-7-2=c8h17o-3-2+c8h17o-7-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10539.	c8h17-2d+c8h17oo-1-2=c8h17o-4-2+c8h17o-1-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10540.	c8h17-2d+c8h17oo-2-2=c8h17o-4-2+c8h17o-2-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10541.	c8h17-2d+c8h17oo-3-2=c8h17o-4-2+c8h17o-3-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10542.	c8h17-2d+c8h17oo-4-2=c8h17o-4-2+c8h17o-4-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10543.	c8h17-2d+c8h17oo-5-2=c8h17o-4-2+c8h17o-5-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10544.	c8h17-2d+c8h17oo-6-2=c8h17o-4-2+c8h17o-6-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10545.	c8h17-2d+c8h17oo-7-2=c8h17o-4-2+c8h17o-7-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10546.	c8h17-2e+c8h17oo-1-2=c8h17o-5-2+c8h17o-1-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10547.	c8h17-2e+c8h17oo-2-2=c8h17o-5-2+c8h17o-2-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10548.	c8h17-2e+c8h17oo-3-2=c8h17o-5-2+c8h17o-3-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10549.	c8h17-2e+c8h17oo-4-2=c8h17o-5-2+c8h17o-4-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10550.	c8h17-2e+c8h17oo-5-2=c8h17o-5-2+c8h17o-5-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10551.	c8h17-2e+c8h17oo-6-2=c8h17o-5-2+c8h17o-6-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10552.	c8h17-2e+c8h17oo-7-2=c8h17o-5-2+c8h17o-7-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10553.	c8h17-2f+c8h17oo-1-2=c8h17o-6-2+c8h17o-1-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10554.	c8h17-2f+c8h17oo-2-2=c8h17o-6-2+c8h17o-2-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10555.	c8h17-2f+c8h17oo-3-2=c8h17o-6-2+c8h17o-3-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10556.	c8h17-2f+c8h17oo-4-2=c8h17o-6-2+c8h17o-4-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10557.	c8h17-2f+c8h17oo-5-2=c8h17o-6-2+c8h17o-5-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10558.	c8h17-2f+c8h17oo-6-2=c8h17o-6-2+c8h17o-6-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10559.	c8h17-2f+c8h17oo-7-2=c8h17o-6-2+c8h17o-7-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10560.	c8h17-2g+c8h17oo-1-2=c8h17o-7-2+c8h17o-1-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10561.	c8h17-2g+c8h17oo-2-2=c8h17o-7-2+c8h17o-2-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10562.	c8h17-2g+c8h17oo-3-2=c8h17o-7-2+c8h17o-3-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10563.	c8h17-2g+c8h17oo-4-2=c8h17o-7-2+c8h17o-4-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10564.	c8h17-2g+c8h17oo-5-2=c8h17o-7-2+c8h17o-5-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10565.	c8h17-2g+c8h17oo-6-2=c8h17o-7-2+c8h17o-6-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10566.	c8h17-2g+c8h17oo-7-2=c8h17o-7-2+c8h17o-7-2	7.00E+12	0.0	-1000.0
10567.	c8h17-2a+ho2=c8h17o-1-2+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
10568.	c8h17-2b+ho2=c8h17o-2-2+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
10569.	c8h17-2c+ho2=c8h17o-3-2+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
10570.	c8h17-2d+ho2=c8h17o-4-2+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
10571.	c8h17-2e+ho2=c8h17o-5-2+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
10572.	c8h17-2f+ho2=c8h17o-6-2+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
10573.	c8h17-2g+ho2=c8h17o-7-2+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
10574.	c8h17-2a+ch3o2=c8h17o-1-2+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
10575.	c8h17-2b+ch3o2=c8h17o-2-2+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
10576.	c8h17-2c+ch3o2=c8h17o-3-2+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
10577.	c8h17-2d+ch3o2=c8h17o-4-2+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
10578.	c8h17-2e+ch3o2=c8h17o-5-2+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
10579.	c8h17-2f+ch3o2=c8h17o-6-2+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
10580.	c8h17-2g+ch3o2=c8h17o-7-2+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0

10581. c8h17oo-1-2=c8ooh1-2a 3.75E+10 0.0 24000.0
10582. c8h17oo-1-2=c8ooh1-2b 1.00E+11 0.0 23700.0
10583. c8h17oo-1-2=c8ooh1-2c 2.50E+10 0.0 20450.0
10584. c8h17oo-1-2=c8ooh1-2d 3.12E+09 0.0 18650.0
10585. c8h17oo-1-2=c8ooh1-2e 3.91E+08 0.0 21650.0
10586. c8h17oo-2-2=c8ooh2-2a 6.00E+11 0.0 29000.0
10587. c8h17oo-2-2=c8ooh2-2c 2.00E+11 0.0 26450.0
10588. c8h17oo-2-2=c8ooh2-2d 2.50E+10 0.0 20450.0
10589. c8h17oo-2-2=c8ooh2-2e 3.12E+09 0.0 18650.0
10590. c8h17oo-2-2=c8ooh2-2f 3.91E+08 0.0 21650.0
10591. c8h17oo-3-2=c8ooh3-2a 7.50E+10 0.0 24000.0
10592. c8h17oo-3-2=c8ooh3-2b 1.00E+11 0.0 23700.0
10593. c8h17oo-3-2=c8ooh3-2d 2.00E+11 0.0 26450.0
10594. c8h17oo-3-2=c8ooh3-2e 2.50E+10 0.0 20450.0
10595. c8h17oo-3-2=c8ooh3-2f 3.12E+09 0.0 18650.0
10596. c8h17oo-3-2=c8ooh3-2g 5.86E+08 0.0 25200.0
10597. c8h17oo-4-2=c8ooh4-2a 9.38E+09 0.0 21650.0
10598. c8h17oo-4-2=c8ooh4-2b 1.25E+10 0.0 18700.0
10599. c8h17oo-4-2=c8ooh4-2c 2.00E+11 0.0 26450.0
10600. c8h17oo-4-2=c8ooh4-2e 2.00E+11 0.0 26450.0
10601. c8h17oo-4-2=c8ooh4-2f 2.50E+10 0.0 20450.0
10602. c8h17oo-4-2=c8ooh4-2g 4.69E+09 0.0 21950.0
10603. c8h17oo-5-2=c8ooh5-2a 1.17E+09 0.0 25150.0
10604. c8h17oo-5-2=c8ooh5-2b 1.56E+09 0.0 16650.0
10605. c8h17oo-5-2=c8ooh5-2c 2.50E+10 0.0 20450.0
10606. c8h17oo-5-2=c8ooh5-2d 2.00E+11 0.0 26450.0
10607. c8h17oo-5-2=c8ooh5-2f 2.00E+11 0.0 26450.0
10608. c8h17oo-5-2=c8ooh5-2g 3.75E+10 0.0 24000.0
10609. c8h17oo-6-2=c8ooh6-2b 1.95E+08 0.0 19650.0
10610. c8h17oo-6-2=c8ooh6-2c 3.12E+09 0.0 18650.0
10611. c8h17oo-6-2=c8ooh6-2d 2.50E+10 0.0 20450.0
10612. c8h17oo-6-2=c8ooh6-2e 2.00E+11 0.0 26450.0
10613. c8h17oo-6-2=c8ooh6-2g 3.00E+11 0.0 29000.0
10614. c8h17oo-7-2=c8ooh7-2c 3.91E+08 0.0 21650.0
10615. c8h17oo-7-2=c8ooh7-2d 3.12E+09 0.0 18650.0
10616. c8h17oo-7-2=c8ooh7-2e 2.50E+10 0.0 20450.0
10617. c8h17oo-7-2=c8ooh7-2f 2.00E+11 0.0 26450.0
10618. c8h17oo-1-2<=>c8h16-1-2+ho2 2.27E+35 -7.2 39440.0
10619. c8h17oo-2-2<=>c8h16-1-2+ho2 5.92E+42 -9.4 41530.0
10620. c8h17oo-2-2<=>c8h16-2-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10621. c8h17oo-3-2<=>c8h16-2-2+ho2 2.27E+35 -7.2 39440.0
10622. c8h17oo-3-2<=>c8h16-3-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10623. c8h17oo-4-2<=>c8h16-3-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10624. c8h17oo-4-2<=>c8h16-4-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10625. c8h17oo-5-2<=>c8h16-4-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10626. c8h17oo-5-2<=>c8h16-5-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10627. c8h17oo-6-2<=>c8h16-5-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10628. c8h17oo-6-2<=>c8h16-6-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10629. c8h17oo-7-2<=>c8h16-6-2+ho2 4.31E+36 -7.5 39510.0
10630. c8h17oo-1-2+ho2=c8h17ooh-1-2+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
10631. c8h17oo-2-2+ho2=c8h17ooh-2-2+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
10632. c8h17oo-3-2+ho2=c8h17ooh-3-2+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
10633. c8h17oo-4-2+ho2=c8h17ooh-4-2+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
10634. c8h17oo-5-2+ho2=c8h17ooh-5-2+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
10635. c8h17oo-6-2+ho2=c8h17ooh-6-2+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
10636. c8h17oo-7-2+ho2=c8h17ooh-7-2+o2 1.75E+10 0.0 -3275.0
10637. c8h17oo-1-2+h2o2=c8h17ooh-1-2+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
10638. c8h17oo-2-2+h2o2=c8h17ooh-2-2+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
10639. c8h17oo-3-2+h2o2=c8h17ooh-3-2+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
10640. c8h17oo-4-2+h2o2=c8h17ooh-4-2+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
10641. c8h17oo-5-2+h2o2=c8h17ooh-5-2+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
10642. c8h17oo-6-2+h2o2=c8h17ooh-6-2+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
10643. c8h17oo-7-2+h2o2=c8h17ooh-7-2+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
10644. c8h17oo-1-2+ch3o2=c8h17o-1-2+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10645. c8h17oo-2-2+ch3o2=c8h17o-2-2+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10646. c8h17oo-3-2+ch3o2=c8h17o-3-2+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10647. c8h17oo-4-2+ch3o2=c8h17o-4-2+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10648. c8h17oo-5-2+ch3o2=c8h17o-5-2+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10649. c8h17oo-6-2+ch3o2=c8h17o-6-2+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10650. c8h17oo-7-2+ch3o2=c8h17o-7-2+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10651. c8h17oo-1-2+c8h17oo-1-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-2+c8h17o-1-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10652. c8h17oo-1-2+c8h17oo-2-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-2+c8h17o-2-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10653. c8h17oo-1-2+c8h17oo-3-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-2+c8h17o-3-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10654. c8h17oo-1-2+c8h17oo-4-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-2+c8h17o-4-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10655. c8h17oo-1-2+c8h17oo-5-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-2+c8h17o-5-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10656. c8h17oo-1-2+c8h17oo-6-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-2+c8h17o-6-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10657. c8h17oo-1-2+c8h17oo-7-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-1-2+c8h17o-7-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10658. c8h17oo-2-2+c8h17oo-2-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-2-2+c8h17o-2-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10659. c8h17oo-2-2+c8h17oo-3-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-2-2+c8h17o-3-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10660. c8h17oo-2-2+c8h17oo-4-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-2-2+c8h17o-4-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10661. c8h17oo-2-2+c8h17oo-5-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-2-2+c8h17o-5-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10662. c8h17oo-2-2+c8h17oo-6-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-2-2+c8h17o-6-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10663. c8h17oo-2-2+c8h17oo-7-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-2-2+c8h17o-7-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10664. c8h17oo-3-2+c8h17oo-3-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-3-2+c8h17o-3-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10665. c8h17oo-3-2+c8h17oo-4-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-3-2+c8h17o-4-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10666. c8h17oo-3-2+c8h17oo-5-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-3-2+c8h17o-5-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10667. c8h17oo-3-2+c8h17oo-6-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-3-2+c8h17o-6-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10668. c8h17oo-3-2+c8h17oo-7-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-3-2+c8h17o-7-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10669. c8h17oo-4-2+c8h17oo-4-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-4-2+c8h17o-4-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10670. c8h17oo-4-2+c8h17oo-5-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-4-2+c8h17o-5-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10671. c8h17oo-4-2+c8h17oo-6-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-4-2+c8h17o-6-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10672. c8h17oo-4-2+c8h17oo-7-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-4-2+c8h17o-7-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10673. c8h17oo-5-2+c8h17oo-5-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-5-2+c8h17o-5-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10674. c8h17oo-5-2+c8h17oo-6-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-5-2+c8h17o-6-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10675. c8h17oo-5-2+c8h17oo-7-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-5-2+c8h17o-7-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10676. c8h17oo-6-2+c8h17oo-6-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-6-2+c8h17o-6-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10677. c8h17oo-6-2+c8h17oo-7-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-6-2+c8h17o-7-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10678. c8h17oo-7-2+c8h17oo-7-2 1.40E+16 -1.6 1860.0
=c8h17o-7-2+c8h17o-7-2+o2
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10679. c8h17ooh-1-2=c8h17o-1-2+oh 1.00E+16 0.0 39000.0
10680. c8h17ooh-2-2=c8h17o-2-2+oh 1.00E+16 0.0 39000.0
10681. c8h17ooh-3-2=c8h17o-3-2+oh 1.00E+16 0.0 39000.0
10682. c8h17ooh-4-2=c8h17o-4-2+oh 1.00E+16 0.0 39000.0
10683. c8h17ooh-5-2=c8h17o-5-2+oh 1.00E+16 0.0 39000.0
10684. c8h17ooh-6-2=c8h17o-6-2+oh 1.00E+16 0.0 39000.0
10685. c8h17ooh-7-2=c8h17o-7-2+oh 1.00E+16 0.0 39000.0
10686. ch2o+Bc7h15=c8h17o-1-2 1.00E+11 0.0 11900.0
10687. aceton+Ac5h11=c8h17o-2-2 1.00E+11 0.0 11900.0
10688. ic3h7cho+pc4h9=c8h17o-3-2 1.00E+11 0.0 11900.0
10689. nc3h7hco+ic4h9=c8h17o-4-2 1.00E+11 0.0 11900.0
10690. ethco+dc5h11=c8h17o-5-2 1.00E+11 0.0 11900.0
10691. ch3hco+ec6h13=c8h17o-6-2 1.00E+11 0.0 11900.0
10692. ch2o+c7h15-2f=c8h17o-7-2 1.00E+11 0.0 11900.0
10693. c8ooh1-2b=c8h16o1-2-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10694. c8ooh2-2a=c8h16o1-2-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10695. c8ooh2-2c=c8h16o2-3-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10696. c8ooh3-2b=c8h16o2-3-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10697. c8ooh3-2d=c8h16o3-4-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10698. c8ooh4-2c=c8h16o3-4-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10699. c8ooh4-2e=c8h16o4-5-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10700. c8ooh5-2d=c8h16o4-5-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10701. c8ooh5-2f=c8h16o5-6-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10702. c8ooh6-2e=c8h16o5-6-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10703. c8ooh6-2g=c8h16o6-7-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10704. c8ooh7-2f=c8h16o6-7-2+oh 6.00E+11 0.0 22000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10705. c8ooh1-2a=c8h16o1-1-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10706. c8ooh1-2c=c8h16o1-3-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10707. c8ooh2-2d=c8h16o2-4-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10708. c8ooh3-2a=c8h16o1-3-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10709. c8ooh3-2e=c8h16o3-5-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10710. c8ooh4-2b=c8h16o2-4-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10711. c8ooh4-2f=c8h16o4-6-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10712. c8ooh5-2c=c8h16o3-5-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10713. c8ooh5-2g=c8h16o5-7-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10714. c8ooh6-2d=c8h16o4-6-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10715. c8ooh7-2e=c8h16o5-7-2+oh 7.50E+10 0.0 15300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10716. c8ooh1-2d=c8h16o1-4-2+oh 9.38E+09 0.0 7000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10717. c8ooh2-2e=c8h16o2-5-2+oh 9.38E+09 0.0 7000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10718. c8ooh3-2f=c8h16o3-6-2+oh 9.38E+09 0.0 7000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 0.00E+00 0.0 0.0
10719. c8ooh4-2g=c8h16o4-7-2+oh 9.38E+09 0.0 7000.0

```
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10720. c8ooh4-2a=c8h16o1-4-2+oh                  9.38E+09    0.0    7000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10721. c8ooh5-2b=c8h16o2-5-2+oh                  9.38E+09    0.0    7000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10722. c8ooh6-2c=c8h16o3-6-2+oh                  9.38E+09    0.0    7000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10723. c8ooh7-2d=c8h16o4-7-2+oh                  9.38E+09    0.0    7000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10724. c8ooh1-2e=c8h16o1-5-2+oh                  1.17E+09    0.0    1800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10725. c8ooh2-2f=c8h16o2-6-2+oh                  1.17E+09    0.0    1800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10726. c8ooh3-2g=c8h16o3-7-2+oh                  1.17E+09    0.0    1800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10727. c8ooh5-2a=c8h16o1-5-2+oh                  1.17E+09    0.0    1800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10728. c8ooh6-2b=c8h16o2-6-2+oh                  1.17E+09    0.0    1800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10729. c8ooh7-2c=c8h16o3-7-2+oh                  1.17E+09    0.0    1800.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10730. c8h16-1-2+ho2=c8ooh1-2b                   1.00E+11    0.0   11900.0
10731. c8h16-1-2+ho2=c8ooh2-2a                   1.00E+11    0.0   11900.0
10732. c8h16-2-2+ho2=c8ooh2-2c                   1.00E+11    0.0   11900.0
10733. c8h16-2-2+ho2=c8ooh3-2b                   1.00E+11    0.0   11900.0
10734. c8h16-3-2+ho2=c8ooh3-2d                   1.00E+11    0.0   11900.0
10735. c8h16-3-2+ho2=c8ooh4-2c                   1.00E+11    0.0   11900.0
10736. c8h16-4-2+ho2=c8ooh4-2e                   1.00E+11    0.0   11900.0
10737. c8h16-4-2+ho2=c8ooh5-2d                   1.00E+11    0.0   11900.0
10738. c8h16-5-2+ho2=c8ooh5-2f                   1.00E+11    0.0   11900.0
10739. c8h16-5-2+ho2=c8ooh6-2e                   1.00E+11    0.0   11900.0
10740. c8h16-6-2+ho2=c8ooh6-2g                   1.00E+11    0.0   11900.0
10741. c8h16-6-2+ho2=c8ooh7-2f                   1.00E+11    0.0   11900.0
10742. c8ooh1-2a=c7h14-1+ch2o+oh                 1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10743. c8ooh1-2c=c7h14-2+ch2o+oh                 1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10744. c8ooh2-2d=c5h10+aceton+oh                 1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10745. c8ooh3-2e=c4h8+ic3h7cho+oh                1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10746. c8ooh3-2a=c3h6+nc4h9hco+oh                1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10747. c8ooh4-2b=ic4h8+nc3h7hco+oh               1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10748. c8ooh4-2f=c3h6+ic4h9cho+oh                1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10749. c8ooh5-2c=cc5h10+ethco+oh                 1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10750. c8ooh5-2g=c2h4+ic5h11cho+oh               1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10751. c8ooh6-2d=dc6h12+ch3hco+oh                1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10752. c8ooh7-2e=c7h14-5-2+ch2o+oh               1.00E+13    0.0   30000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10753. c8ooh1-2a+o2=c8ooh1-oo1-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10754. c8ooh1-2b+o2=c8ooh1-oo2-2                 1.41E+13    0.0       0.0
10755. c8ooh1-2c+o2=c8ooh1-oo3-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10756. c8ooh1-2d+o2=c8ooh1-oo4-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10757. c8ooh1-2e+o2=c8ooh1-oo5-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10758. c8ooh2-2a+o2=c8ooh2-oo1-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10759. c8ooh2-2c+o2=c8ooh2-oo3-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10760. c8ooh2-2d+o2=c8ooh2-oo4-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10761. c8ooh2-2e+o2=c8ooh2-oo5-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10762. c8ooh2-2f+o2=c8ooh2-oo6-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10763. c8ooh3-2a+o2=c8ooh3-oo1-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10764. c8ooh3-2b+o2=c8ooh3-oo2-2                 1.41E+13    0.0       0.0
10765. c8ooh3-2d+o2=c8ooh3-oo4-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10766. c8ooh3-2e+o2=c8ooh3-oo5-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10767. c8ooh3-2f+o2=c8ooh3-oo6-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10768. c8ooh3-2g+o2=c8ooh3-oo7-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10769. c8ooh4-2a+o2=c8ooh4-oo1-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10770. c8ooh4-2b+o2=c8ooh4-oo2-2                 1.41E+13    0.0       0.0
10771. c8ooh4-2c+o2=c8ooh4-oo3-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10772. c8ooh4-2e+o2=c8ooh4-oo5-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10773. c8ooh4-2f+o2=c8ooh4-oo6-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10774. c8ooh4-2g+o2=c8ooh4-oo7-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10775. c8ooh5-2a+o2=c8ooh5-oo1-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10776. c8ooh5-2b+o2=c8ooh5-oo2-2                 1.41E+13    0.0       0.0
10777. c8ooh5-2c+o2=c8ooh5-oo3-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10778. c8ooh5-2d+o2=c8ooh5-oo4-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10779. c8ooh5-2f+o2=c8ooh5-oo6-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10780. c8ooh5-2g+o2=c8ooh5-oo7-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10781. c8ooh6-2b+o2=c8ooh6-oo2-2                 1.41E+13    0.0       0.0
10782. c8ooh6-2c+o2=c8ooh6-oo3-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10783. c8ooh6-2d+o2=c8ooh6-oo4-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10784. c8ooh6-2e+o2=c8ooh6-oo5-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10785. c8ooh6-2g+o2=c8ooh6-oo7-2                 4.52E+12    0.0       0.0
10786. c8ooh7-2c+o2=c8ooh7-oo3-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10787. c8ooh7-2d+o2=c8ooh7-oo4-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10788. c8ooh7-2e+o2=c8ooh7-oo5-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10789. c8ooh7-2f+o2=c8ooh7-oo6-2                 7.54E+12    0.0       0.0
10790. c8ooh1-oo1-2=c8ket1-1-2+oh                2.50E+10    0.0   21000.0
10791. c8ooh1-oo2-2=c8ket1-2-2+oh                2.00E+11    0.0   26000.0
10792. c8ooh1-oo3-2=c8ket1-3-2+oh                2.50E+10    0.0   21000.0
10793. c8ooh1-oo4-2=c8ket1-4-2+oh                3.12E+09    0.0   18950.0
10794. c8ooh1-oo5-2=c8ket1-5-2+oh                3.90E+08    0.0   22150.0
10795. c8ooh3-oo1-2=c8ket3-1-2+oh                1.25E+10    0.0   17450.0
10796. c8ooh3-oo2-2=c8ket3-2-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10797. c8ooh3-oo4-2=c8ket3-4-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10798. c8ooh3-oo5-2=c8ket3-5-2+oh                1.25E+10    0.0   17450.0
10799. c8ooh3-oo6-2=c8ket3-6-2+oh                1.56E+09    0.0   15650.0
10800. c8ooh3-oo7-2=c8ket3-7-2+oh                1.96E+08    0.0   18650.0
10801. c8ooh4-oo1-2=c8ket4-1-2+oh                1.56E+09    0.0   15650.0
10802. c8ooh4-oo2-2=c8ket4-2-2+oh                1.25E+10    0.0   17450.0
10803. c8ooh4-oo3-2=c8ket4-3-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10804. c8ooh4-oo5-2=c8ket4-5-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10805. c8ooh4-oo6-2=c8ket4-6-2+oh                1.25E+10    0.0   17450.0
10806. c8ooh4-oo7-2=c8ket4-7-2+oh                1.56E+09    0.0   15650.0
10807. c8ooh5-oo1-2=c8ket5-1-2+oh                1.96E+08    0.0   18650.0
10808. c8ooh5-oo2-2=c8ket5-2-2+oh                1.56E+09    0.0   15650.0
10809. c8ooh5-oo3-2=c8ket5-3-2+oh                1.25E+10    0.0   17450.0
10810. c8ooh5-oo4-2=c8ket5-4-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10811. c8ooh5-oo6-2=c8ket5-6-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10812. c8ooh5-oo7-2=c8ket5-7-2+oh                1.25E+10    0.0   17450.0
10813. c8ooh6-oo2-2=c8ket6-2-2+oh                1.96E+08    0.0   18650.0
10814. c8ooh6-oo3-2=c8ket6-3-2+oh                1.56E+09    0.0   15650.0
10815. c8ooh6-oo4-2=c8ket6-4-2+oh                1.25E+10    0.0   17450.0
10816. c8ooh6-oo5-2=c8ket6-5-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10817. c8ooh6-oo7-2=c8ket6-7-2+oh                1.00E+11    0.0   23450.0
10818. c8ooh7-oo3-2=c8ket7-3-2+oh                3.91E+08    0.0   22150.0
10819. c8ooh7-oo4-2=c8ket7-4-2+oh                3.12E+09    0.0   18950.0
10820. c8ooh7-oo5-2=c8ket7-5-2+oh                2.50E+10    0.0   21000.0
10821. c8ooh7-oo6-2=c8ket7-6-2+oh                2.00E+11    0.0   26000.0
10822. c8ket1-1-2=ch2o+acrol+oh+pc4h9            1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10823. c8ket1-2-2=ch3co+hco+oh+Ac5h11            1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10824. c8ket1-3-2=ch3chcho+oh+nc4h9hco           1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10825. c8ket1-4-2=ic3h6cho+oh+nc3h7hco           1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10826. c8ket1-5-2=c4h8cho4-2+oh+ethco            1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10827. c8ket3-1-2=ch2o+oh+nc4h9coc2h4p           1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10828. c8ket3-2-2=aceton+oh+nc4h9co              1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10829. c8ket3-4-2=ethco+oh+ic4h9co               1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10830. c8ket3-5-2=ic3h7coch2+oh+ethco            1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10831. c8ket3-6-2=ic3h7coc2h4p+oh+ch3hco         1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10832. c8ket3-7-2=ic3h7coc3h6p+oh+ch2o           1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10833. c8ket4-1-2=ch2o+oh+c3h6+c3h7co            1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10834. c8ket4-2-2=aceton+oh+nc3h7cooch2          1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0   47410.0
10835. c8ket4-3-2=ic3h7cho+oh+c3h7co             1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10836. c8ket4-5-2=ic4h9co+oh+ethco               1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10837. c8ket4-6-2=ic4h9cooch2+oh+ch3hco          1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10838. c8ket4-7-2=ic4h9coc2h4p+oh+ch2o           1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10839. c8ket5-1-2=ch2o+oh+c3h6+c2h5cooch2        1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10840. c8ket5-2-2=aceton+oh+c2h5coc2h4p          1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10841. c8ket5-3-2=ic3h7cho+oh+c2h5cooch2         1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10842. c8ket5-4-2=ic4h9cho+oh+c2h5co             1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10843. c8ket5-6-2=ic5h11co+oh+ch3hco             1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10844. c8ket5-7-2=ic5h11cooch2+oh+ch2o           1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10845. c8ket6-2-2=aceton+oh+c3h6cooch3-1         1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10846. c8ket6-3-2=ic3h7cho+oh+ch3coc2h4p         1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10847. c8ket6-4-2=ic4h9cho+oh+ch2cooch3          1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10848. c8ket6-5-2=ic5h11cho+oh+ch3co             1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10849. c8ket6-7-2=ic6h13co+oh+ch2o               1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10850. c8ket7-3-2=ic3h7cho+oh+c3h6cho-1          1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10851. c8ket7-4-2=ic4h9cho+oh+ch2ch2hco          1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10852. c8ket7-5-2=ic5h11cho+oh+ch2hco            1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10853. c8ket7-6-2=ic6h13cho+oh+hco               1.00E+16    0.0   39000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10854. c8h16o1-1-2+oh=c7h14-1+hco+h2o            2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10855. c8h16o1-1-2+oh=Gc7h13-1+ch2o+h2o          2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10856. c8h16o1-2-2+oh=Gc7h13-1+ch2o+h2o          2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10857. c8h16o1-2-2+oh=pc4h9+ic3h5cho+h2o         2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10858. c8h16o1-3-2+oh=c7h14-2+hco+h2o            2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10859. c8h16o1-3-2+oh=nc4h9co+c3h6+h2o           2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10860. c8h16o1-4-2+oh=c5h10+ch3chcho+h2o         2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10861. c8h16o1-4-2+oh=nc3h7cooch2+c3h6+h2o       2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10862. c8h16o1-5-2+oh=c4h8+ic3h6cho+h2o          2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10863. c8h16o1-5-2+oh=c2h5coc2h4p+c3h6+h2o       2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10864. c8h16o2-3-2+oh=nc4h9hco+tc3h5+h2o         2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10865. c8h16o2-3-2+oh=pc4h9+ic3h6co+h2o          2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10866. c8h16o2-4-2+oh=nc3h7hco+ic4h7+h2o         2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10867. c8h16o2-4-2+oh=c3h7co+ic4h8+h2o           2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10868. c8h16o2-5-2+oh=ethco+ic5h9+h2o            2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10869. c8h16o2-5-2+oh=c2h5cooch2+ic4h8+h2o       2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10870. c8h16o2-6-2+oh=ch3hco+ic6h11+h2o          2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10871. c8h16o2-6-2+oh=ch3coc2h4p+ic4h8+h2o       2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10872. c8h16o3-4-2+oh=c2h5+ic3h7coc2h3+h2o       2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
10873. c8h16o3-4-2+oh=nc3h7+ic3h7chco+h2o        2.50E+12    0.0       0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00    0.0       0.0
```

```
10874. c8h16o3-5-2+oh=c4h8+ic3h7co+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10875. c8h16o3-5-2+oh=c2h5co+cc5h10+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10876. c8h16o3-6-2+oh=c3h6+ic3h7coch2+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10877. c8h16o3-6-2+oh=ch2coch3+cc5h10+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10878. c8h16o3-7-2+oh=c2h4+ic3h7coc2h4p+h2o     2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10879. c8h16o3-7-2+oh=ch2ch2hco+cc5h10+h2o      2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10880. c8h16o4-5-2+oh=c2h5chco+ic4h9+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10881. c8h16o4-5-2+oh=c2h5coc2h3+ic3h7+h2o      2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10882. c8h16o4-6-2+oh=c3h6+ic4h9co+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10883. c8h16o4-6-2+oh=ch3co+dc6h12+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10884. c8h16o4-7-2+oh=ch2hco+dc6h12+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10885. c8h16o4-7-2+oh=c2h4+ic4h9coch2+h2o       2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10886. c8h16o5-6-2+oh=ch3chco+dc5h11+h2o        2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10887. c8h16o5-6-2+oh=mvk+ic4h9+h2o             2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10888. c8h16o5-7-2+oh=hco+c7h14-5-2+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10889. c8h16o5-7-2+oh=c2h4+ic5h11co+h2o         2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10890. c8h16o6-7-2+oh=acrol+dc5h11+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10891. c8h16o6-7-2+oh=ch2co+ec6h13+h2o          2.50E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10892. c8h16o1-1-2+ho2=c7h14-1+hco+h2o2         5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10893. c8h16o1-1-2+ho2=Gc7h13-1+ch2o+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10894. c8h16o1-2-2+ho2=Gc7h13-1+ch2o+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10895. c8h16o1-2-2+ho2=pc4h9+ic3h5cho+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10896. c8h16o1-3-2+ho2=c7h14-2+hco+h2o2         5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10897. c8h16o1-3-2+ho2=nc4h9co+c3h6+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10898. c8h16o1-4-2+ho2=c5h10+ch3chcho+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10899. c8h16o1-4-2+ho2=nc3h7coch2+c3h6+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10900. c8h16o1-5-2+ho2=c4h8+ic3h6cho+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10901. c8h16o1-5-2+ho2=c2h5coc2h4p+c3h6+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10902. c8h16o2-3-2+ho2=nc4h9hco+tc3h5+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10903. c8h16o2-3-2+ho2=pc4h9+ic3h6co+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10904. c8h16o2-4-2+ho2=nc3h7hco+ic4h7+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10905. c8h16o2-4-2+ho2=c3h7co+ic4h8+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10906. c8h16o2-5-2+ho2=ethco+ic5h9+h2o2         5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10907. c8h16o2-5-2+ho2=c2h5coch2+ic4h8+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10908. c8h16o2-6-2+ho2=ch3hco+ic6h11+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10909. c8h16o2-6-2+ho2=ch3coc2h4p+ic4h8+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10910. c8h16o3-4-2+ho2=c2h5+ic3h7coc2h3+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10911. c8h16o3-4-2+ho2=nc3h7+ic3h7chco+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10912. c8h16o3-5-2+ho2=c4h8+ic3h7co+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10913. c8h16o3-5-2+ho2=c2h5co+cc5h10+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10914. c8h16o3-6-2+ho2=c3h6+ic3h7coch2+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10915. c8h16o3-6-2+ho2=ch2coch3+cc5h10+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10916. c8h16o3-7-2+ho2=c2h4+ic3h7coc2h4p+h2o2   5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10917. c8h16o3-7-2+ho2=ch2ch2hco+cc5h10+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10918. c8h16o4-5-2+ho2=c2h5chco+ic4h9+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10919. c8h16o4-5-2+ho2=c2h5coc2h3+ic3h7+h2o2    5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10920. c8h16o4-6-2+ho2=c3h6+ic4h9co+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10921. c8h16o4-6-2+ho2=ch3co+dc6h12+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10922. c8h16o4-7-2+ho2=ch2hco+dc6h12+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10923. c8h16o4-7-2+ho2=c2h4+ic4h9coch2+h2o2     5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10924. c8h16o5-6-2+ho2=ch3chco+dc5h11+h2o2      5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10925. c8h16o5-6-2+ho2=mvk+ic4h9+h2o2           5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10926. c8h16o5-7-2+ho2=hco+c7h14-5-2+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10927. c8h16o5-7-2+ho2=c2h4+ic5h11co+h2o2       5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10928. c8h16o6-7-2+ho2=acrol+dc5h11+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10929. c8h16o6-7-2+ho2=ch2co+ec6h13+h2o2        5.00E+12    0.0    17700.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10930. c7h15-2f=dc5h11+c2h4                     2.64E+15   -0.6    31136.0
10931. h+c7h14-5-2=c7h15-2f                     2.50E+11    0.5     2620.0
10932. c7h14-5-2+oh=c7h13-1-2+h2o               3.28E+08    1.6      -35.0
10933. c7h14-5-2+ho2=c7h13-1-2+h2o2             4.42E+02    3.4    13720.0
10934. c7h14-5-2+h=c7h13-1-2+h2                 9.10E+06    2.4     4471.0
10935. c7h14-5-2+ch3=c7h13-1-2+ch4              1.06E+01    3.5     5481.0
10936. c7h14-5-2+o=c7h13-1-2+oh                 3.86E+06    2.5     2830.0
10937. c7h14-5-2+oh=ch3hco+dc5h11               1.00E+11    0.0    -4000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10938. c7h14-5-2+oh=ch2o+ec6h13                 1.00E+11    0.0    -4000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10939. c7h14-5-2+o=ch3hco+cc5h10                1.00E+11    0.0    -1050.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10940. c7h14-5-2+o=ch2o+dc6h12                  1.00E+11    0.0    -1050.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10941. c7h14-5-2=ic4h7+nc3h7                    2.50E+16    0.0    71000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         1.00E+13    0.0        0.0
10942. ic3h7coch2=ic3h7+ch2co                   2.88E+15   -0.5    39940.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         8.00E+10    0.0    10600.0
10943. ic3h7coc3h6p=ic3h7coch2+c2h4             5.00E+17   -1.5    26000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         2.50E+11    0.0     7800.0
10944. ic4h9coc2h4p=ic4h9co+c2h4                5.00E+17   -1.5    26000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         2.50E+11    0.0     7800.0
10945. ic3h7coc2h3+oh=ic3h6coc2h3+h2o           1.53E+08    1.5     8775.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         3.04E+07    1.5    28210.0
10946. ic3h7coc2h3+oh=tc3h6coc2h3+h2o           1.68E+12    0.0     -781.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         1.07E+10    0.5    23210.0
10947. ic3h7coc2h3+oh=ch3hco+ic3h7co            1.53E+08    1.5     8775.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         1.01E+03    2.8    28410.0
10948. ic3h7coc2h3+ho2=ic3h6coc2h3+h2o2         2.74E+04    2.5    15500.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         3.23E+04    2.2     3467.0
10949. ic3h7coc2h3+ho2=tc3h6coc2h3+h2o2         8.00E+10    0.0    11920.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         3.03E+09    0.2     4451.0
10950. ic3h7coc2h3+ho2=ch2hco+ic3h7co+oh        6.03E+09    0.0     7949.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         1.00E+00    0.0        0.0
10951. ic3h7coc2h3+ch3o2=ic3h6coc2h3+ch3o2h     2.00E+04    2.5    15500.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         9.69E+04    2.0     2747.0
10952. ic3h7coc2h3+ch3o2=tc3h6coc2h3+ch3o2h     3.61E+03    2.5     8032.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         5.61E+02    2.5     -156.8
10953. ic3h7coc2h3+ch3o2=ch2hco+ic3h7co+ch3o    3.97E+11    0.0    17050.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         1.00E+00    0.0        0.0
10954. ic3h6coc2h3=c3h6+c2h3co                  1.12E+17   -1.2    20600.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         8.00E+10    0.0    10600.0
10955. tc3h6coc2h3=ic3h6co+c2h3                 1.46E+13   -0.1    47250.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         8.00E+10    0.0    11600.0
10956. ic3h7chco+h=h2+c3h6+hcco                 3.00E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10957. ic3h7chco+o=oh+c3h6+hcco                 3.00E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10958. ic3h7chco+oh=h2o+c3h6+hcco               3.00E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10959. ic3h7chco+ho2=h2o2+c3h6+hcco             5.00E+12    0.0    15000.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10960. ic3h7chco+h=pc4h9+co                     3.00E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10961. ic3h7chco+o=c4h8+co2                     3.00E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
10962. ic3h7chco+oh=pc4h9+co2                   3.00E+12    0.0        0.0
        Reverse Arrhenius coefficients:         0.00E+00    0.0        0.0
```

Annexe-IV : Donnée thermodynamiques

$\Delta H_f(298)$: Enthalpie de formation standard à 298 K [kcal.mol^{-1}]

S(298) : Entropie de formation à 298 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

$C_p(300)$: Capacité calorifique à pression constante à 300 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

$C_p(400)$: Capacité calorifique à pression constante à 400 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

$C_p(500)$: Capacité calorifique à pression constante à 500 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

$C_p(600)$: Capacité calorifique à pression constante à 600 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

$C_p(800)$: Capacité calorifique à pression constante à 800 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

$C_p(1000)$: Capacité calorifique à pression constante à 1000 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

$C_p(1500)$: Capacité calorifique à pression constante à 1500 K [cal.mol^{-1}.K^{-1}]

UNITS:KCAL

SPECIES	HF(298)	S(298)	CP300	CP400	CP500	CP600	CP800	CP1000	CP1500
h2	.00	31.21	6.90	6.96	7.00	7.02	7.07	7.21	7.73
o2	.00	49.01	7.01	7.22	7.44	7.65	8.07	8.35	8.72
*h	52.10	27.39	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97
o	59.56	38.47	5.23	5.14	5.08	5.05	5.02	5.00	4.98
oh	8.90	43.91	7.16	7.08	7.05	7.06	7.15	7.33	7.87
ho2	2.94	54.76	8.35	8.89	9.46	9.99	10.77	11.38	12.48
h2o	-57.80	45.13	8.03	8.19	8.42	8.68	9.26	9.87	11.31
h2o2	-32.48	56.06	10.15	11.09	11.99	12.79	13.99	14.95	16.59
n2	.00	45.77	6.95	7.01	7.08	7.19	7.50	7.83	8.32
*ar	.00	36.98	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97
co	-26.42	47.24	6.96	7.02	7.12	7.27	7.62	7.93	8.40
co2	-94.05	51.10	8.89	9.86	10.66	11.32	12.29	12.98	13.91
ch4	-17.83	44.53	8.53	9.65	11.04	12.48	15.04	17.16	20.58
ch3	35.06	46.37	9.20	9.98	10.75	11.50	12.86	14.09	16.25
ch2	93.50	46.47	8.37	8.73	9.07	9.39	9.97	10.59	11.77
sch2	102.48	45.22	8.08	8.33	8.66	9.04	9.83	10.57	11.91
ch	142.01	43.72	6.95	7.00	7.05	7.11	7.37	7.78	8.75
C	171.31	37.78	4.98	4.98	4.98	4.97	4.97	4.98	4.97
ch3oh	-48.06	57.28	10.51	12.40	14.25	16.01	19.07	21.40	25.02
ch3o	3.90	54.61	9.08	10.79	12.43	13.98	16.63	18.60	21.51
ch2oh	-4.25	58.36	11.36	12.82	14.19	15.34	17.07	18.42	20.64
ch2o	-25.98	52.28	8.47	9.36	10.44	11.52	13.37	14.82	16.93
hco	10.11	53.60	8.29	8.75	9.29	9.84	10.85	11.66	12.94
ch3o2	4.16	63.02	13.79	16.20	18.23	19.94	22.64	24.60	27.58
ch3o2h	-31.33	67.40	15.55	18.10	20.33	22.27	25.42	27.76	31.42
hco3	-80.73	68.29	14.85	16.89	18.52	19.81	21.61	22.72	24.41
hco3h	-132.03	69.89	16.62	18.79	20.64	22.16	24.37	25.91	28.03
ho2cho	-67.41	73.87	15.22	17.67	19.71	21.39	23.91	25.57	27.64
o2cho	-31.30	74.09	13.30	14.75	16.04	17.18	19.05	20.45	22.47
ocho	-38.24	57.95	9.86	11.57	13.01	14.20	15.98	17.14	18.51
hoch2o	-39.07	66.11	13.07	14.75	16.38	17.92	20.66	22.84	26.03
hocho	-90.21	59.41	10.86	12.86	14.58	16.05	18.36	20.00	22.24
c2h6	-20.04	54.73	12.58	15.69	18.62	21.30	25.82	29.30	34.61
c2h4	12.55	52.42	10.29	12.58	14.88	16.95	20.05	22.49	26.19
c2h5	28.61	58.07	12.16	14.64	17.12	19.39	22.96	25.79	30.17
c2h2	54.20	48.02	10.62	11.99	13.08	13.95	15.27	16.31	18.27
c2h3	71.64	55.90	10.24	12.03	13.71	15.17	17.34	19.07	21.81
c2h	135.88	50.98	10.05	10.54	10.88	11.19	11.90	12.56	13.88
c2	200.24	47.64	10.27	9.49	8.94	8.60	8.45	8.62	8.93
c2o	68.51	55.68	10.31	11.09	11.72	12.24	13.06	13.66	14.64
ch3hco	-39.72	63.09	13.26	15.78	18.29	20.58	24.16	26.91	30.96
ch3co	-2.46	63.92	12.17	14.27	16.30	18.13	20.99	23.19	26.34
ch3co3	-42.35	77.37	19.97	23.01	25.58	27.74	31.09	33.48	37.05
ch3co3h	-76.16	78.50	22.01	25.92	29.15	31.82	35.80	38.48	42.16
ch3co2	-51.38	64.94	14.78	17.74	20.26	22.41	25.78	28.20	31.77
ch2hco	3.17	63.64	13.60	15.87	17.81	19.44	21.97	23.88	26.88
ch2co	-11.40	57.81	12.40	14.20	15.67	16.89	18.79	20.25	22.48
hcco	42.45	60.75	12.65	13.47	14.23	14.92	16.07	16.83	17.98
ch3co2	-51.38	64.94	14.78	17.74	20.26	22.41	25.78	28.20	31.77
c2h5oh	-56.15	67.06	15.67	19.31	22.84	25.96	30.59	34.15	39.53
c2h5o	-4.07	64.44	13.95	17.60	20.72	23.38	27.61	30.71	35.44
ch3choh	-9.33	62.71	14.64	17.64	20.37	22.84	26.98	30.13	34.71
c2h5o2	-6.86	73.85	18.27	22.14	25.71	28.75	33.14	36.37	41.03
c2h5o2h	-40.24	77.25	19.92	24.09	27.66	30.69	35.42	38.82	45.10
c2h4o	-13.37	57.99	11.35	14.87	17.90	20.48	24.55	27.48	31.78
c2h4o2h	7.26	77.37	19.99	23.63	26.51	28.87	32.63	35.60	40.89
ho2c2h4o2	-23.89	90.68	25.47	30.84	35.16	38.62	43.55	46.64	50.55
ho2ch2cho	-57.06	83.25	21.07	25.29	28.74	31.53	35.49	37.86	40.33
ch2cho2h	-10.87	73.60	13.95	19.15	23.29	26.54	31.02	33.67	36.36
c2h2oh	32.88	65.72	13.19	14.59	16.17	17.74	20.41	22.51	25.78
hccoh	20.43	58.71	13.22	14.78	16.16	17.35	19.15	20.30	22.29
chocho	-50.63	65.34	14.92	17.46	19.69	21.54	24.14	25.88	28.09
choco	-18.33	66.10	14.88	16.40	17.99	19.39	21.21	22.31	23.45
c2h3o	31.53	61.10	10.41	13.53	16.11	18.21	21.33	23.41	26.45
pc2h4oh	-5.70	69.72	16.47	19.38	22.06	24.40	27.94	30.70	35.00
o2c2h4oh	-38.80	84.73	21.34	24.77	27.71	30.25	34.42	37.73	43.67
h2cc	99.13	52.82	10.20	11.20	12.09	12.86	14.14	15.19	16.95
c3h8	-24.82	64.57	17.67	22.49	26.86	30.74	37.01	41.73	48.83
nc3h7	24.22	69.42	17.12	21.14	24.95	28.33	33.53	37.59	43.91
ic3h7	21.56	69.34	15.73	19.52	23.37	26.91	32.52	36.89	43.58
c3h6	4.78	63.73	15.47	19.17	22.71	25.88	30.78	34.56	40.26
ac3h5	39.10	61.87	15.22	18.99	22.28	25.04	29.06	32.12	36.74
c3h5-aoo	21.08	78.60	20.98	25.85	29.82	33.04	37.76	41.00	48.53
c3h5-aooh	-14.03	83.09	22.75	27.74	31.92	35.37	40.54	44.16	52.31
tc3h5	56.80	63.59	14.80	18.40	21.70	24.57	28.93	32.25	37.18
sc3h5	63.46	64.84	15.21	18.29	21.14	23.66	27.60	30.66	35.43
pc3h4	44.32	59.34	14.57	17.28	19.70	21.80	25.12	27.71	31.71
ac3h4	45.63	58.18	14.13	17.11	19.77	22.04	25.40	27.99	31.90
c3h3	84.01	61.34	15.56	17.83	19.55	20.92	23.11	24.81	27.54
c3h2	106.53	56.22	13.21	15.25	16.95	18.32	20.25	21.63	24.12
nc3h7o	-9.17	75.07	19.99	24.90	29.18	32.88	38.84	43.28	50.03
nc3h7oh	-61.59	77.50	20.85	25.97	30.50	34.49	41.04	45.94	53.09
nc3h7o2	-11.93	84.69	24.14	28.85	33.02	36.70	42.78	47.42	54.61
nc3h7o2h	-50.77	84.11	25.99	31.81	36.73	40.84	47.13	51.66	59.70
ic3h7o	-13.54	73.07	20.56	25.62	29.95	33.65	39.50	43.80	50.43
ic3h7o2	-15.67	79.63	24.21	29.92	34.63	38.51	44.35	48.49	55.09
ic3h7o2h	-49.50	81.96	26.34	32.38	37.49	41.79	48.48	53.28	60.40
c3h6ooh1-2	1.42	88.83	25.18	30.14	34.25	37.67	43.02	47.04	53.61
c3h6ooh1-3	3.62	88.68	25.32	30.52	34.76	38.24	43.58	47.51	53.91
c3h6ooh2-1	-2.67	87.56	25.91	31.30	35.59	39.04	44.22	48.00	54.17
c3h6ooh1-1	-2.28	88.83	25.25	30.31	34.39	37.73	42.95	46.92	53.40
c3h6ooh1-2	-35.13	100.42	31.86	38.28	43.48	47.66	53.71	57.77	64.55
c3h6ooh1-3	-30.08	102.91	31.27	37.50	42.65	46.86	53.08	57.28	64.30
c3h6ooh2-1	-35.13	100.41	31.85	38.29	43.49	47.66	53.70	57.78	64.55
c3h6ooh1-1	-38.26	97.29	29.74	36.51	42.09	46.57	52.75	56.50	63.21
c3ket12	-67.64	90.75	26.84	32.54	37.27	41.18	47.07	51.11	56.80
c3ket13	-64.01	90.85	27.31	32.28	36.54	40.18	45.93	50.11	56.22
c3ket21	-71.32	90.94	27.10	31.82	35.98	39.62	45.54	49.93	56.20
c3h6o	-22.23	68.53	17.31	21.75	25.72	29.31	35.42	39.99	46.66
c3h6o1-3	-18.36	64.86	15.69	21.06	25.70	29.69	35.95	40.33	45.90
c3h5o	22.12	71.76	17.17	20.91	24.36	27.41	32.22	35.84	41.41
c3h4oh	14.48	77.87	10.27	28.74	40.85	48.17	53.73	53.90	55.03
c3h4o2h	42.66	83.57	23.19	27.10	30.51	33.46	38.22	41.74	46.96
c3h4o	-16.08	67.32	16.39	20.01	23.20	25.91	30.00	32.94	37.16
c3h3o	39.24	95.11	30.72	38.96	46.02	51.96	61.06	67.75	77.84
c3h5o2h	-13.89	83.09	22.75	27.75	31.92	35.37	40.54	44.17	50.58
c3h5e1q2	-15.47	81.21	24.18	29.26	33.39	36.72	41.71	45.33	51.70
c3h5oq	-59.81	129.96	56.06	71.32	84.72	96.33	114.70	128.27	152.59
ethco	-44.25	69.03	18.07	22.25	26.21	29.73	35.18	39.32	45.51
c2h5co	-7.85	75.12	16.27	19.59	22.94	25.99	30.70	34.31	39.70
c2h5co3	-51.37	85.62	21.76	27.46	32.02	35.64	40.91	44.82	57.91

c2h5co3h	-86.47	90.08	23.53	29.36	34.12	37.97	43.69	47.98	61.37
c2h5co2	-52.00	75.03	19.87	24.63	28.50	31.63	36.26	39.80	51.82
aceton	-51.34	70.66	17.81	21.78	25.69	29.21	34.63	38.76	44.84
acrol	-16.27	73.56	17.27	20.72	23.95	26.76	30.93	34.02	38.43
c2h3co	21.16	71.86	14.73	17.45	19.99	22.19	25.46	27.89	31.47
ch2coch3	-7.97	73.50	17.47	20.98	24.28	27.17	31.57	34.91	39.98
c3h5oh	-48.56	93.88	30.74	37.50	43.51	48.78	57.15	63.17	73.61
c3h6oh	-12.59	80.44	20.19	25.02	29.14	32.66	38.20	42.27	48.66
o2c3h6oh	-43.96	91.33	26.90	32.53	37.40	41.60	48.30	53.24	60.52
ch3chco	-1.43	36.12	10.58	13.01	15.22	17.22	20.61	23.27	27.19
ch2ch2hco	4.50	77.53	18.59	21.99	25.01	27.68	32.10	35.45	40.50
o2c2h4hco	-29.99	89.13	24.92	29.73	33.69	36.92	41.77	45.29	54.14
qch2chhco	-24.89	91.51	26.59	31.13	34.74	37.63	41.99	45.32	53.95
qqjch2chhc	-36.81	107.21	32.33	38.44	43.27	47.04	52.24	55.60	65.46
ho2c2h4co	-29.79	95.05	25.71	29.96	33.46	36.35	40.81	44.18	52.92
qch2ch2co3	-71.36	105.02	29.40	35.83	40.88	44.80	50.26	54.10	68.11
ho2c2h4hco	-65.10	93.60	26.68	31.63	35.79	39.25	44.55	48.45	57.92
oc2h4hco	-29.63	80.91	20.38	24.87	28.61	31.73	36.56	40.22	48.85
ch3cocho	-64.49	78.42	19.06	22.98	26.41	29.38	34.12	37.53	42.17
ch3coco	-33.58	77.03	18.88	22.09	24.85	27.22	30.94	33.59	37.30
ch2cohco	-22.18	77.26	19.44	23.15	26.25	28.81	32.68	35.28	38.72
hcoch2hco	-67.05	80.19	17.75	21.82	25.39	28.49	33.46	37.03	41.74
hcoch2co	-31.74	83.01	16.76	20.17	23.09	25.59	29.51	32.31	36.22
ch3coch2o2	-35.38	92.65	25.67	29.37	32.69	35.64	40.59	44.46	50.54
ch3coch2o	-33.71	80.46	21.23	25.02	28.43	31.48	36.55	40.42	46.11
ch3coch2o2	-71.49	92.43	27.71	32.27	36.25	39.71	45.29	49.45	55.63
propynal	3.53	43.50	17.22	19.98	22.16	23.84	26.13	27.48	29.15
c2hco	39.43	42.39	15.80	18.00	19.74	21.10	22.96	24.08	25.45
c3h61oh	-15.01	79.84	20.64	25.06	28.85	32.13	37.56	41.83	48.03
c3h61oh2oo	-51.11	92.19	27.28	33.35	38.34	42.41	48.44	52.66	62.48
c3h62oh	-16.41	77.50	21.22	26.37	30.56	34.01	39.29	43.12	49.62
c3h62oh1oo	-51.11	92.19	27.28	33.35	38.34	42.41	48.44	52.66	62.48
ch3chcho	-2.79	70.68	18.81	22.54	25.69	28.36	32.67	36.15	44.00
hccco	99.27	34.30	8.69	9.87	10.80	11.53	12.60	13.30	14.40
c4h722	53.50	74.87	19.96	23.86	27.86	31.58	37.53	42.14	49.15
c4h712	55.25	71.86	20.16	24.83	29.15	32.95	38.85	43.37	50.26
c4h5-2	73.15	71.89	18.65	22.02	25.12	27.87	32.23	35.61	40.81
c4h6o25	-26.00	67.94	18.18	24.03	29.42	33.95	40.17	44.65	50.94
c4h612	38.55	69.55	18.88	23.27	27.22	30.60	35.69	39.60	45.57
c2h3choch2	-18.47	103.39	23.44	28.74	33.26	37.08	42.95	47.06	54.24
c4h6o23	-17.30	67.94	18.18	24.03	29.42	33.95	40.17	44.65	50.94
c4h4o	5.43	73.89	19.63	23.77	27.36	30.38	34.86	38.12	42.68
c4h5o	26.04	102.84	21.44	26.31	30.43	33.89	39.15	42.78	49.37
sc3h5cho	39.94	81.90	20.55	24.94	28.65	31.80	36.82	40.51	45.88
sc4h9oh	-69.91	85.64	27.15	33.82	39.63	44.67	52.73	58.60	67.58
sc4h9o	-16.54	82.72	25.43	31.98	37.60	42.41	50.00	55.47	63.76
c3h6cho-2	-7.74	80.01	24.40	29.72	34.12	37.81	43.72	48.37	58.44
c3h6cho-3	-3.44	84.42	24.29	29.33	33.52	37.07	42.79	47.40	55.61
c3h6cho-4	-1.24	84.26	24.44	29.71	34.04	37.64	43.36	47.87	57.73
c2h5chco	-6.46	45.27	15.53	19.79	23.51	26.74	31.91	35.69	41.55
c3h6cho-4o	-34.94	98.49	30.38	36.69	41.93	46.26	52.84	57.63	68.80
but4ooh1*o	-70.04	102.95	32.15	38.59	44.03	48.59	55.62	60.79	72.60
c3h6cho-4o	-34.58	90.28	25.84	31.83	36.86	41.07	47.64	52.56	63.55
choc2h4cho	-69.95	87.80	25.80	30.83	35.06	38.63	44.35	48.78	56.27
choc2h4co	-79.19	90.04	22.57	28.23	33.10	37.27	43.89	48.94	59.76
pc4h8oh-2	-19.37	88.59	26.16	32.38	37.53	41.86	48.80	54.15	63.40
sc4h8oh-1	-21.14	87.88	27.08	33.30	38.49	42.87	49.81	54.95	62.82

sc4h8oh-3	-23.34	88.04	26.94	32.91	37.98	42.30	49.25	54.49	62.52
pc4h8oh-2o	-55.52	101.55	32.74	40.31	46.58	51.75	59.52	65.00	77.14
sc4h8oh-1o	-55.52	101.55	32.74	40.31	46.59	51.75	59.52	65.00	77.14
sc4h8oh-3o	-61.11	100.44	33.34	41.08	47.41	52.56	60.16	65.49	78.89
c4h91o2	-15.17	91.49	29.09	36.10	42.04	47.05	54.81	60.32	69.75
c4h92o2	-20.08	90.38	29.68	36.88	42.87	47.85	55.42	60.83	72.30
c4h81ooh2j	-3.67	98.20	30.75	37.30	42.67	47.12	54.07	59.26	68.33
c4h81ooh3j	-3.67	98.20	30.65	37.10	42.49	47.01	54.11	59.37	68.53
c4h81ooh4j	-1.47	98.05	30.79	37.48	43.00	47.58	54.67	59.84	68.84
c4h82ooh1j	-7.22	96.93	31.39	38.25	43.83	48.39	55.29	60.34	71.42
c4h82ooh3j	-8.72	97.09	31.24	37.87	43.32	47.82	54.72	59.88	71.09
c4h82ooh4j	-6.52	96.93	31.38	38.26	43.84	48.39	55.29	60.34	71.39
but1ooh2o2	-39.53	109.78	37.32	45.24	51.73	57.01	64.77	70.11	82.47
but1ooh3o2	-40.07	109.78	37.33	45.24	51.73	57.01	64.77	70.10	82.45
but1ooh4o2	-35.03	112.27	36.74	44.46	50.89	56.20	64.16	69.61	79.74
but2ooh1o2	-39.53	109.78	37.33	45.24	51.73	57.01	64.77	70.10	82.47
but2ooh3o2	-45.12	110.04	37.93	46.00	52.55	57.82	65.42	70.60	84.13
but2ooh4o2	-40.07	109.78	37.32	45.24	51.73	57.01	64.77	70.11	82.47
but1ooh2*o	-76.64	100.54	33.24	39.31	44.59	49.18	56.60	62.15	70.42
but2ooh1*o	-73.06	101.63	31.93	38.93	44.75	49.56	56.75	61.82	73.73
but3ooh1*o	-75.09	101.84	32.75	39.36	44.86	49.40	56.27	61.29	74.24
but4ooh2*o	-70.04	102.95	32.15	38.59	44.03	48.59	55.62	60.79	72.60
but3ooh2*o	-80.02	99.08	31.59	38.84	44.93	50.02	57.82	63.27	71.04
c4h8cy1o2	-44.05	66.75	24.42	31.26	36.81	41.39	48.54	53.98	62.89
c4h8cy1o3	-44.05	66.75	24.42	31.26	36.81	41.39	48.54	53.98	62.89
c4h8cy1o4	-44.05	66.75	24.42	31.26	36.81	41.39	48.54	53.98	62.89
c4h8cy2o3	-44.05	66.75	24.42	31.26	36.81	41.39	48.54	53.98	62.89
c4h91o2h	-50.13	95.96	30.87	38.00	44.13	49.38	57.59	63.48	73.58
pc4h9o	-14.67	83.27	24.55	31.25	36.97	41.86	49.58	55.25	64.83
c4h92o2h	-55.18	94.84	31.46	38.77	44.97	50.18	58.21	63.98	76.10
c4h73o2	11.13	88.18	27.36	33.63	38.85	43.16	49.56	53.79	60.50
c4h71o2	13.51	87.14	26.50	32.44	37.50	41.78	48.39	52.95	58.99
c4h63ooh4j	24.13	94.73	29.05	35.01	39.81	43.69	49.43	53.31	59.58
c4h61ooh4j	9.31	90.81	27.54	33.50	38.51	42.70	49.09	53.45	59.25
c4h63ooh4o	-8.33	107.58	35.00	41.99	47.70	52.32	58.92	63.08	70.49
c4h61ooh4o	-5.21	106.51	33.53	40.83	46.73	51.43	58.14	62.63	74.49
c4h54o2h3*	-44.53	99.81	26.84	32.83	38.21	43.00	50.75	56.09	58.89
c4h54o2h1*	-42.81	99.29	27.15	33.66	39.33	44.24	52.11	57.91	67.40
tc3h6cho	-11.73	76.93	21.80	27.51	32.36	36.48	43.01	48.01	58.55
ic3h5cho	-27.34	74.65	23.18	28.32	32.61	36.20	41.71	45.61	51.52
ic3h6co	-28.06	75.35	24.27	28.96	32.92	36.26	41.48	45.29	51.24
ic3h7cho	-51.13	79.61	22.13	28.58	34.09	38.77	46.10	51.50	62.59
ic3h7co	-15.83	81.05	21.16	26.91	31.77	35.88	42.35	47.23	57.62
ic3h6cho	-2.33	83.06	22.06	28.06	32.95	36.98	43.18	47.85	57.95
ic3h5co	9.56	75.77	22.35	26.88	30.65	33.78	38.54	41.88	46.88
c3h5oh	-29.81	74.46	18.60	22.83	26.53	29.75	34.96	38.82	44.64
ch2cch2oh	27.09	76.27	18.24	21.60	24.59	27.24	31.61	34.92	39.88
ch3chcoch3	-16.84	78.64	24.42	29.25	33.52	37.29	43.54	48.33	54.92
c43oo2*o	-45.08	100.17	30.13	36.44	41.73	46.15	52.98	57.88	65.44
c4j3ooh2*o	-32.18	103.37	31.41	37.94	43.34	47.81	54.53	59.17	65.91
ch3chocho	-31.35	79.59	20.15	25.21	29.33	32.69	37.69	41.25	50.01
ch3ccch2	73.15	71.89	18.65	22.02	25.12	27.87	32.23	35.61	40.81
ch3chcch	76.11	70.23	19.56	23.42	26.72	29.51	33.82	36.99	41.70
h2cccch2	80.94	64.45	18.04	21.48	24.44	26.95	30.81	33.49	37.74
ic4h9o2	-16.63	88.21	29.06	36.12	42.11	47.16	54.96	60.49	69.99
ic4h9o2h	-52.90	92.55	31.48	38.65	44.83	50.15	58.61	64.78	73.95
ic4h9o	-16.34	81.80	25.20	31.81	37.49	42.37	50.11	55.78	64.35

ic4h8io2h	-3.63	96.14	30.76	37.50	43.07	47.69	54.83	60.00	69.08
tc4h8io2h	-8.23	94.01	30.56	36.95	42.23	46.65	53.65	58.97	68.28
o2ic4h8io2	-36.09	108.99	36.70	44.48	50.96	56.32	64.32	69.77	79.98
o2tc4h8io2	-44.40	106.10	37.70	45.44	51.98	57.42	65.43	70.19	71.84
ho2ic4h7io	-70.59	101.76	29.77	36.95	42.95	47.93	55.45	60.78	72.81
ho2tc4h7io	-74.97	83.34	29.76	37.24	43.91	49.74	58.89	64.67	67.33
ic4h7v	54.70	71.17	20.73	25.40	29.41	32.87	38.53	42.86	49.37
ic4h8to2h	-10.85	91.87	31.76	38.46	44.08	48.79	55.94	60.42	60.94
ic4h7oh	-38.51	75.57	24.01	29.95	35.37	40.04	47.05	52.31	60.29
ic4h7o	13.32	79.89	23.08	28.40	33.18	37.29	43.49	48.16	55.16
ic4h6oh	-2.16	80.26	24.19	29.63	34.25	38.18	44.32	48.76	55.43
c3h6cho-3o	-39.98	97.38	30.98	37.46	42.76	47.07	53.48	58.13	70.51
c3h6cho-3o	-37.52	89.16	26.44	32.60	37.68	41.88	48.28	53.06	65.22
ch2chchco	1.82	71.97	21.66	26.24	29.83	32.63	36.55	39.09	43.13
cjhchchco	60.93	73.36	21.62	25.64	28.70	30.99	34.01	35.83	38.77
c4ald3oxo	-79.19	90.04	22.57	28.23	33.10	37.27	43.89	48.94	59.76
mecomeco	-79.19	90.04	22.57	28.23	33.10	37.27	43.89	48.94	59.76
c2h5coco	-32.90	86.96	24.39	29.09	33.13	36.59	42.05	45.96	51.48
c3h6cho-2o	-37.95	97.18	30.16	37.03	42.65	47.23	53.96	58.66	69.99
c3h6cho-2o	-36.30	88.96	25.62	32.17	37.58	42.04	48.76	53.59	64.66
c4ald2oxo	-69.66	74.80	24.84	30.21	34.81	38.72	44.75	48.87	54.74
ic4h10	-32.18	70.59	23.22	29.76	35.61	40.70	48.70	54.60	63.35
ic4h8o	-31.48	71.25	23.39	30.23	35.94	40.69	47.96	53.08	60.80
ic4h8oh	-24.07	84.40	25.88	31.82	36.91	41.29	48.42	53.97	63.54
ic4h9	16.53	73.96	23.11	29.14	34.22	38.53	45.47	50.72	59.09
tc4h9	13.15	77.05	19.79	24.96	30.19	35.01	42.62	48.49	57.37
ic4h8	-4.08	70.04	21.38	26.60	31.21	35.27	41.89	46.83	54.29
ic4h7	32.89	71.89	19.74	24.74	29.23	33.09	38.90	43.33	50.13
c4h4o	5.43	73.89	19.63	23.77	27.36	30.38	34.86	38.12	42.68
c3h4hco	24.25	77.16	20.74	25.62	29.68	33.06	38.18	41.74	46.96
c3h3hco	17.82	77.41	18.52	23.04	27.15	30.83	37.03	41.79	47.83
c3h3co	52.83	74.86	16.00	19.98	23.81	27.36	33.42	37.98	44.11
c4h10	-30.06	74.27	23.55	29.78	35.43	40.42	48.42	54.38	63.23
pc4h9	18.58	77.55	23.28	29.18	34.18	38.44	45.33	50.57	58.57
sc4h9	16.38	77.70	23.13	28.81	33.67	37.87	44.76	50.11	58.27
c4h8	-.07	72.91	20.56	26.07	30.90	35.10	41.84	46.79	54.59
t2c4h8	-2.67	70.82	21.04	25.86	30.55	34.80	41.54	46.70	54.44
c2c4h8	-1.75	72.01	19.25	24.41	29.47	34.02	40.95	46.26	54.16
Ac4h7-1	58.76	74.40	20.09	24.63	28.85	32.55	38.25	42.65	49.39
Cc4h7-1	32.53	73.16	19.39	24.17	28.70	32.67	38.65	43.21	50.12
Dc4h7-1	48.90	75.85	20.35	24.99	29.37	33.21	39.00	43.44	50.22
c4h6	26.29	66.50	19.18	24.22	28.41	31.87	36.99	40.41	47.12
butyne	39.48	69.60	19.64	23.99	27.83	31.12	36.19	40.07	45.99
butyn2	34.97	69.77	18.68	22.55	26.31	29.72	35.14	39.32	45.57
meall	39.34	69.70	19.30	23.66	27.46	30.75	36.04	39.99	45.59
ic4h5	75.34	69.34	18.52	22.64	26.20	29.17	33.57	36.89	41.95
nc4h5	86.84	72.56	17.79	21.68	25.18	28.16	32.57	35.90	40.95
c4h4	69.15	67.35	17.32	20.61	23.62	26.30	30.53	33.20	37.25
nc4h3	129.80	67.34	17.22	20.32	22.71	24.57	27.34	29.43	32.67
ic4h3	119.94	72.98	18.54	21.05	23.09	24.78	27.44	29.50	32.73
c4h2	109.53	59.66	17.68	20.24	21.93	23.16	25.12	26.61	29.01
c4h9qjA	-15.03	91.49	29.09	36.09	42.04	47.05	54.80	60.34	69.41
c4h9qjB	-20.07	90.38	29.68	36.88	42.87	47.85	55.43	60.83	69.67
c4h8rAqA	-7.23	98.20	30.72	37.26	42.63	47.08	54.03	59.25	67.97
c4h8rBqA	-3.53	98.20	30.75	37.30	42.67	47.12	54.06	59.27	67.99
c4h8rCqA	-3.53	98.20	30.65	37.09	42.49	47.02	54.10	59.39	68.19
c4h8rDqA	-1.33	98.05	30.79	37.47	43.00	47.59	54.66	59.85	68.49

c4h8rAqB	-7.07	96.93	31.38	38.26	43.84	48.38	55.29	60.35	68.75
c4h8rCqB	-8.57	97.09	31.23	37.88	43.32	47.81	54.72	59.88	68.45
c4h8rDqB	-6.37	96.93	31.38	38.26	43.84	48.38	55.29	60.35	68.75
c4h8qjAqA	-43.21	106.66	35.31	43.33	50.25	55.97	64.00	68.80	77.77
c4h8qjBqA	-39.53	111.15	37.32	45.25	51.73	57.01	64.78	70.11	79.12
c4h8qjCqA	-40.07	111.16	37.32	45.25	51.73	57.01	64.78	70.11	79.11
c4h8qjDqA	-35.03	110.89	36.74	44.45	50.89	56.21	64.16	69.62	78.86
c4h8qjAqB	-39.53	109.78	37.32	45.24	51.73	57.01	64.78	70.11	79.12
c4h8qjCqB	-45.12	108.66	37.92	46.02	52.56	57.81	65.42	70.60	79.37
c4h8qjDqB	-40.07	111.15	37.32	45.25	51.73	57.01	64.78	70.12	79.11
c4h8o#3	-33.18	70.61	24.34	30.91	36.59	41.41	48.73	53.71	61.97
c4h8o#4	-29.74	73.06	20.97	28.38	34.39	39.45	48.01	55.46	65.97
c4h8o#5	-44.02	72.28	18.34	25.17	31.80	37.60	45.92	52.04	60.71
c4h7oAqB	-73.06	101.63	31.93	38.93	44.75	49.56	56.75	61.82	73.73
c4h7oAqC	-75.09	101.84	32.75	39.36	44.86	49.40	56.27	61.29	74.24
c4h7oAqD	-70.04	102.95	32.15	38.59	44.03	48.59	55.62	60.79	72.60
c4h7oBqA	-76.27	101.67	32.37	38.62	43.90	48.34	55.26	60.50	73.49
c4h7oBqC	-80.21	100.75	31.27	38.29	44.17	49.06	56.44	61.66	73.14
c4h7oBqD	-77.19	102.07	31.50	37.95	43.44	48.09	55.32	60.62	71.97
nc4h9o2h	-55.18	94.84	31.45	38.77	44.97	50.19	58.20	64.00	74.26
c4h7o2h	-23.97	92.64	29.13	35.50	40.95	45.51	52.33	57.00	65.39
c4h7e1qB	-23.18	89.73	29.71	35.84	41.06	45.48	52.32	57.31	66.01
c4h7oq	-59.81	129.96	56.06	71.32	84.72	96.33	114.70	128.27	152.59
nc3h7hco	-49.43	84.34	24.75	30.27	35.15	39.42	46.32	51.30	57.81
c3h7co	-14.74	83.63	23.54	28.55	32.84	36.54	42.53	47.24	57.41
c4h7oh	-48.56	93.88	30.74	37.50	43.51	48.78	57.15	63.17	73.61
ac3h5hco	-18.05	80.69	21.01	26.12	30.51	34.27	40.21	44.54	50.96
ac3h5co	18.85	81.81	20.18	24.69	28.55	31.85	37.05	40.80	46.33
c2h3chcho	15.45	76.88	19.43	24.30	28.45	31.97	37.47	41.44	47.34
c4h8o2	-48.56	93.88	30.74	37.50	43.51	48.78	57.15	63.17	73.61
butanone	-57.04	80.81	24.60	29.95	34.75	39.02	46.05	51.37	60.35
mvk	-30.40	78.20	21.23	26.36	30.77	34.55	40.53	44.88	51.30
ch2coc2h3	11.90	77.85	21.58	26.51	30.60	33.99	39.11	42.67	47.90
mhd	.00	45.77	6.95	7.01	7.08	7.19	7.50	7.83	8.32
h2c4o	54.57	66.33	17.28	19.58	21.80	23.77	26.72	28.81	31.65
c4h	155.09	60.90	14.10	15.37	16.56	17.66	19.59	21.15	23.44
*c4h6o2h	.00	36.98	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97
hoc4h6	-5.62	82.73	22.85	28.17	32.73	36.65	42.91	47.53	55.51
ch3chch2hc	-3.44	84.42	24.29	29.33	33.52	37.07	42.79	47.40	57.43
c3h6cho-1	-.43	86.95	24.08	28.96	33.25	37.02	43.16	47.79	54.78
ch3coc2h4p	-7.88	85.86	23.40	28.31	32.66	36.50	42.82	47.64	54.95
ch3coc2h4o	-42.08	97.61	29.72	36.06	41.35	45.76	52.53	57.47	68.19
ch3coc2h4o	-77.19	102.07	31.50	37.95	43.44	48.09	55.32	60.62	71.97
ch3coc2h4o	-41.72	89.40	25.18	31.19	36.28	40.57	47.33	52.40	62.92
c2h5coch2	-14.08	84.49	23.40	28.31	32.66	36.50	42.82	47.64	54.95
c2h5coch2o	-41.16	97.21	30.60	36.72	41.80	46.01	52.48	57.34	69.74
c2h5coch2o	-76.27	101.67	32.37	38.62	43.90	48.34	55.26	60.50	73.46
c2h5coch2o	11.53	109.04	41.70	52.54	61.97	70.14	83.17	92.66	107.42
ch3coc2h4q	-42.08	97.61	29.72	36.06	41.35	45.76	52.53	57.47	68.19
ch2coc2h4q	-30.98	101.18	31.22	37.47	42.61	46.85	53.31	58.04	68.48
ch2qjcoc2h	-61.16	116.61	38.24	45.09	50.66	55.17	61.83	66.62	79.92
c4e1ojC	12.92	80.33	23.19	29.39	34.57	38.88	45.40	49.86	56.18
c2h5coch2q	-41.16	97.21	30.60	36.72	41.80	46.01	52.48	57.34	69.74
ch3chcoch2	-36.06	99.59	32.19	37.93	42.68	46.62	52.74	57.49	69.74
ch3chqjcoc	-64.18	116.67	38.01	45.43	51.38	56.13	62.95	67.66	81.08
c4h8hco-2	-8.38	93.79	29.75	36.29	41.77	46.41	53.86	59.74	72.13
c4h7hco-1	-24.21	89.89	27.51	33.75	39.15	43.79	51.19	56.61	64.68

c4h7co-1	12.69	91.01	26.69	32.32	37.19	41.38	48.04	52.90	60.09
c4h7hco-2	-25.92	91.46	26.23	32.66	38.23	43.06	50.80	56.51	65.00
c4h7co-2	10.98	92.58	25.40	31.22	36.28	40.64	47.64	52.77	60.37
acetoch2o2	-42.08	97.61	29.72	36.06	41.35	45.76	52.53	57.47	68.19
acetoch2o	-41.72	89.40	25.18	31.19	36.28	40.57	47.33	52.40	62.92
nc5h12	-37.02	82.12	28.52	36.55	43.66	49.85	59.75	67.13	80.42
Ac5h11	13.71	86.85	28.75	36.11	42.41	47.79	56.40	62.93	74.35
Bc5h11	10.65	89.73	27.72	35.04	41.46	47.01	55.72	62.30	72.63
Cc5h11	11.53	85.40	28.58	35.87	42.05	47.32	55.78	62.35	74.60
c5h10	-5.09	82.96	25.98	32.72	39.09	44.64	52.84	58.91	68.01
c2c5h10	-6.35	82.55	24.45	31.60	37.93	43.39	51.94	58.35	68.29
t2c5h10	-7.55	81.15	24.45	31.60	37.93	43.39	51.94	58.35	68.29
Dc5h9-1	41.47	84.45	25.89	32.22	37.60	42.20	49.60	55.18	63.88
Ac5h9-1	52.27	83.29	25.48	31.91	37.41	42.13	49.69	55.28	64.00
Bc5h9-1	51.86	87.03	25.72	31.93	37.35	42.06	49.69	55.40	64.12
Cc5h9-1	27.89	82.94	25.52	31.99	37.69	42.51	49.70	55.20	63.61
Ec5h9-1	43.96	87.83	25.30	31.77	37.36	42.18	49.88	55.57	64.22
Dc5h9-2	21.95	80.64	25.30	31.88	37.64	42.58	50.24	55.95	64.70
c5h11qjA	-19.97	100.85	34.57	43.04	50.27	56.40	65.88	72.67	83.98
c5h11qjB	-25.02	99.74	35.35	43.58	50.95	57.30	66.81	73.11	84.23
c5h11qjC	-24.48	98.36	35.35	43.58	50.95	57.30	66.81	73.10	84.23
c5h10rAqA	-12.17	107.56	36.20	44.21	50.87	56.43	65.11	71.59	82.55
c5h10rBqA	-8.47	107.57	36.23	44.25	50.91	56.47	65.15	71.61	82.56
c5h10rCqA	-8.47	107.57	36.22	44.25	50.91	56.47	65.14	71.61	82.56
c5h10rDqA	-8.47	107.57	36.12	44.04	50.73	56.36	65.18	71.73	82.76
c5h10rEqA	-6.27	107.41	36.27	44.42	51.24	56.94	65.75	72.19	83.06
c5h10rAqB	-12.02	106.29	37.05	44.95	51.91	57.83	66.68	72.62	83.32
c5h10rBqB	-19.22	105.55	36.88	44.44	51.11	56.83	65.54	71.60	82.53
c5h10rCqB	-13.52	106.45	37.01	44.78	51.58	57.36	66.08	72.04	82.82
c5h10rDqB	-13.52	106.45	36.91	44.57	51.40	57.26	66.11	72.15	83.01
c5h10rEqB	-11.32	106.29	37.06	44.95	51.91	57.83	66.68	72.61	83.32
c5h10rAqC	-10.78	106.29	37.06	44.95	51.91	57.83	66.68	72.61	83.32
c5h10rBqC	-12.98	106.45	36.91	44.57	51.40	57.26	66.11	72.15	83.01
c5h10qjAqA	-48.16	116.02	40.79	50.27	58.48	65.32	75.08	81.14	92.34
c5h10qjBqA	-44.48	119.14	43.00	51.93	59.80	66.46	76.17	82.38	93.68
c5h10qjCqA	-44.48	119.14	43.00	51.94	59.80	66.46	76.17	82.39	93.68
c5h10qjDqA	-45.02	119.14	43.00	51.94	59.80	66.45	76.17	82.39	93.68
c5h10qjEqA	-39.97	121.63	42.22	51.40	59.13	65.56	75.24	81.96	93.42
c5h10qjAqB	-44.48	119.14	43.00	51.93	59.80	66.46	76.17	82.38	93.68
c5h10qjBqB	-52.32	112.20	40.94	50.58	59.00	66.05	76.22	82.81	95.03
c5h10qjCqB	-49.53	119.40	43.39	52.97	60.80	67.16	76.50	82.94	93.93
c5h10qjDqB	-50.07	119.40	43.39	52.97	60.80	67.16	76.50	82.94	93.93
c5h10qjEqB	-45.02	119.14	43.00	51.93	59.80	66.46	76.17	82.39	93.68
c5h10qjAqC	-44.48	120.51	43.00	51.93	59.80	66.46	76.17	82.39	93.68
c5h10qjBqC	-49.53	118.02	43.39	52.97	60.80	67.16	76.50	82.94	93.93
c5h9oAqA	-96.36	108.80	34.46	43.28	50.61	56.66	65.84	72.66	90.95
c5h9oAqB	-78.01	110.99	37.40	45.88	52.99	58.90	67.82	74.15	88.40
c5h9oAqC	-79.50	111.19	38.22	46.31	53.10	58.74	67.34	73.62	88.92
c5h9oAqD	-80.04	111.19	38.22	46.32	53.10	58.74	67.34	73.63	88.91
c5h9oAqE	-74.99	112.31	37.62	45.55	52.27	57.94	66.70	73.13	87.24
c5h9oBqA	-81.21	111.03	37.84	45.58	52.14	57.69	66.33	72.84	88.18
c5h9oBqC	-85.15	110.11	36.74	45.24	52.41	58.40	67.51	73.99	87.81
c5h9oBqD	-87.18	110.31	37.56	45.68	52.52	58.24	67.03	73.46	88.32
c5h9oBqE	-82.13	111.43	36.96	44.91	51.69	57.44	66.39	72.97	86.70
c5h9oCqA	-82.42	111.53	37.47	45.47	52.17	57.74	66.32	72.83	90.23
c5h9oCqB	-85.44	110.21	37.24	45.81	52.89	58.70	67.44	73.87	91.36
c5h10o-AB	-32.54	85.22	29.20	37.12	44.01	49.93	59.18	65.50	72.70

c5h10o-BC	-37.59	82.72	29.80	37.88	44.83	50.74	59.82	66.00	74.43
c5h10o-AC	-39.73	77.17	27.03	36.11	43.46	49.60	59.73	68.29	81.02
c5h10o-BD	-39.73	77.17	27.03	36.11	43.46	49.60	59.73	68.29	81.02
c5h10o-AD	-53.98	78.92	31.25	39.84	46.92	52.71	61.39	67.81	85.28
c5h10o-AE	-54.33	74.64	30.80	38.92	45.93	51.92	61.11	67.10	71.96
Ac5h9o#5	-14.08	80.16	30.92	38.96	45.50	50.78	58.59	64.36	81.46
Dc5h9o#5	-14.08	79.25	30.89	38.84	45.22	50.35	58.01	63.81	81.00
nc5h11o2h	-59.59	102.82	37.13	45.47	53.05	59.63	69.59	76.27	88.81
c5h9o2h	-31.68	101.17	34.61	42.15	48.67	54.24	62.86	68.99	79.71
c5h9e2qC	-28.20	98.87	34.62	42.66	49.39	54.99	63.54	69.76	80.68
nc4h9hco	-54.36	91.58	30.32	37.30	43.42	48.75	57.40	63.86	73.59
nc4h9co	-17.46	92.70	29.52	35.88	41.46	46.33	54.24	60.16	69.08
c3h7coch3	-61.81	90.49	29.65	36.68	42.86	48.27	57.09	63.73	73.80
nc3h7coch2	-19.51	87.77	29.41	36.19	42.01	47.00	54.97	60.88	70.01
nc3h7coch2	-46.11	106.58	36.07	43.68	50.05	55.36	63.55	69.68	84.44
nc3h7coch2	-81.21	111.03	37.84	45.58	52.14	57.69	66.33	72.84	88.18
nc3h7coch2	-45.75	98.37	31.53	38.82	44.97	50.17	58.34	64.61	79.16
c3h6coch3-	-12.81	93.91	28.83	35.27	40.91	45.86	53.91	59.96	69.09
ch3coc3h6o	-47.03	106.97	35.19	43.01	49.60	55.11	63.61	69.81	82.91
ch3coc3h6o	-82.13	111.43	36.96	44.91	51.69	57.44	66.39	72.97	86.70
ch3coc3h6o	-46.67	98.76	30.65	38.15	44.52	49.92	58.40	64.74	77.61
c3h6coch3-	-15.46	94.93	28.01	34.33	39.96	44.94	53.15	59.34	68.47
c3h6coch3-	-22.01	88.12	28.34	35.17	41.10	46.22	54.46	60.58	69.84
c2h5coc2h5	-62.21	89.30	30.26	37.20	43.25	48.53	57.10	63.54	73.35
c2h5coc2h4	-13.20	94.09	29.50	35.82	41.34	46.14	53.95	59.82	68.76
c2h5coc2h4	-47.32	107.07	35.70	43.57	50.07	55.41	63.54	69.67	86.56
c2h5coc2h4	-82.42	111.53	37.47	45.47	52.17	57.74	66.32	72.84	90.21
c2h5coc2h4	-46.96	98.86	31.16	38.72	45.00	50.22	58.33	64.61	81.28
c2h5coc2h4	-22.40	88.30	29.02	35.72	41.51	46.51	54.53	60.49	69.58
c2h5coc2h4	-47.32	107.07	35.70	43.58	50.07	55.41	63.54	69.68	86.58
ch3chcoc2h	-42.22	109.47	37.30	44.78	50.95	56.03	63.81	69.81	86.59
ch3chqjcoc	-70.33	125.16	43.12	52.28	59.65	65.53	74.01	79.99	97.92
c2h5coc2h3	-35.72	86.43	27.45	33.91	39.43	44.15	51.63	57.14	65.53
pc2h4coc2h	13.28	89.84	26.66	32.57	37.55	41.76	48.41	53.42	62.04
sc2h4coc2h	4.08	84.06	26.13	32.41	37.70	42.15	49.04	53.95	61.24
divinket	-9.74	81.21	24.65	30.61	35.56	39.68	45.99	50.50	57.59
c5h9oh	-48.56	93.88	30.74	37.50	43.51	48.78	57.15	63.17	73.61
c5h10qj	-48.56	93.88	30.74	37.50	43.51	48.78	57.15	63.17	73.61
c5h8-12	34.01	78.87	24.56	30.53	35.73	40.21	47.32	52.43	60.39
c5h8-13	18.15	76.25	24.40	30.82	36.14	40.56	47.35	52.40	60.28
c5h8-14	25.41	79.99	23.22	29.61	35.03	39.62	46.81	52.02	59.98
c5h7	52.94	74.43	23.50	29.59	35.12	39.82	46.54	51.08	56.90
c5oBqjA	-46.11	106.58	36.06	43.69	50.05	55.35	63.55	69.69	84.43
Cc5oBqA	-41.01	108.59	37.77	45.10	51.11	56.08	63.78	69.71	84.24
c5oBqAqjC	-69.12	124.65	43.48	52.38	59.63	65.48	74.02	79.99	95.73
Ec5oB	-13.33	92.75	29.24	36.03	41.70	46.48	54.12	60.05	71.84
c5oBqjE	-47.03	106.97	35.19	43.01	49.60	55.11	63.61	69.81	82.91
Cc5oBqE	-41.93	108.94	36.89	44.43	50.66	55.83	63.84	69.83	82.73
c5oBqEqjC	-70.05	125.05	42.79	51.52	58.98	65.25	74.50	79.86	79.54
c5e1qjE	9.97	98.53	31.98	39.59	46.01	51.40	59.65	65.41	75.08
Cc5e1qE	6.37	101.73	32.93	40.05	46.11	51.26	59.27	64.96	74.69
c5e1qEqjC	-13.27	116.94	40.47	48.95	55.95	61.66	70.00	75.41	84.73
c5e1oEqC	-48.29	109.00	35.86	43.10	49.11	54.05	61.40	66.63	79.81
isoph	40.04	83.22	26.30	32.77	38.23	42.86	50.26	55.78	64.22
isope	17.85	75.34	25.27	31.79	37.07	41.37	47.97	52.87	60.59
isopy	75.64	81.81	24.56	29.42	33.96	37.98	44.16	48.67	55.22
c6h14	-43.22	85.97	34.10	43.56	51.90	59.15	70.69	79.23	94.48

Ac6h13	8.73	96.29	34.25	43.06	50.64	57.13	67.48	75.26	88.92
Bc6h13	6.54	96.45	34.10	42.68	50.13	56.56	66.90	74.81	89.28
Cc6h13	6.54	96.45	34.20	42.89	50.31	56.67	66.87	74.70	89.08
c6h12-1	-10.03	92.34	31.41	39.63	47.39	54.12	63.87	70.94	81.47
c6h12-2	-12.05	87.44	30.93	38.83	46.18	52.65	62.61	70.23	81.74
c6h12-3	-12.05	87.44	30.93	38.83	46.18	52.65	62.61	70.23	81.74
Cc6h11-1	23.53	88.65	30.04	38.32	45.46	51.61	61.40	68.56	79.21
Fc6h11-1	39.03	97.25	30.77	38.74	45.62	51.53	60.96	67.90	78.41
Ac6h11-3	36.26	98.98	30.18	38.20	45.13	51.10	60.63	67.67	78.37
Bc6h11-3	17.66	89.10	30.78	38.30	44.92	50.76	60.36	67.62	78.63
c6h10-13	13.98	89.07	28.95	36.16	42.72	48.39	56.96	63.49	73.36
c6h10-15	20.15	89.22	28.78	36.58	43.24	48.87	57.56	64.01	73.94
c6h9	50.45	89.22	28.20	35.78	42.15	47.46	55.53	61.42	70.27
c6h13qjA	-24.92	110.22	40.04	49.99	58.51	65.75	76.96	85.01	98.54
c6h13qjB	-29.97	109.10	40.82	50.52	59.19	66.65	77.90	85.44	98.80
c6h13qjC	-29.43	109.10	40.83	50.52	59.19	66.65	77.90	85.44	98.80
c6h13qA	-60.03	114.67	41.81	51.90	60.61	68.07	79.76	88.13	102.06
c6h13qB	-65.07	113.56	42.56	52.51	61.27	68.89	80.76	88.40	90.89
c6h13qC	-64.53	113.56	42.56	52.51	61.27	68.89	80.76	88.40	90.89
c6h13ojA	-25.20	102.45	35.62	45.00	53.16	60.24	71.56	79.78	91.09
c6h13ojB	-27.51	100.89	36.25	45.75	54.11	61.37	72.76	80.17	82.11
c6h13ojC	-26.97	100.89	36.25	45.75	54.11	61.37	72.76	80.18	82.11
c6h12rAqA	-17.12	116.93	41.67	51.16	59.11	65.78	76.19	83.93	97.12
c6h12rBqA	-13.42	116.93	41.70	51.20	59.15	65.82	76.23	83.95	97.13
c6h12rCqA	-13.42	116.93	41.70	51.20	59.15	65.82	76.23	83.95	97.13
c6h12rDqA	-13.42	116.93	41.70	51.19	59.14	65.82	76.23	83.95	97.12
c6h12rEqA	-13.42	116.93	41.60	50.99	58.96	65.71	76.26	84.06	97.32
c6h12rFqA	-11.22	116.78	41.74	51.37	59.48	66.28	76.83	84.53	97.63
c6h12rAqB	-16.97	115.66	42.52	51.91	60.15	67.18	77.76	84.96	97.89
c6h12rBqB	-24.17	114.91	42.36	51.39	59.36	66.18	76.62	83.94	97.09
c6h12rCqB	-18.47	115.82	42.48	51.73	59.82	66.71	77.16	84.38	97.38
c6h12rDqB	-18.47	115.82	42.48	51.73	59.82	66.71	77.16	84.38	97.38
c6h12rEqB	-18.47	115.82	42.38	51.52	59.64	66.61	77.19	84.49	97.59
c6h12rFqB	-16.27	115.66	42.53	51.90	60.15	67.18	77.76	84.95	97.88
c6h12rAqC	-15.73	115.66	42.53	51.90	60.15	67.18	77.76	84.95	97.88
c6h12rBqC	-17.93	115.82	42.38	51.52	59.64	66.61	77.19	84.49	97.59
c6h12rCqC	-23.63	114.91	42.46	51.60	59.54	66.29	76.58	83.83	96.90
c6h12rDqC	-17.93	115.82	42.48	51.73	59.82	66.71	77.16	84.38	97.38
c6h12rEqC	-17.93	115.82	42.38	51.52	59.64	66.61	77.19	84.49	97.59
c6h12rFqC	-15.73	115.66	42.53	51.90	60.15	67.18	77.76	84.95	97.88
c6h12qjAqA	-53.10	125.38	46.26	57.23	66.72	74.67	86.16	93.48	106.90
c6h12qjBqA	-49.43	128.50	48.48	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h12qjCqA	-49.43	129.88	48.48	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h12qjDqA	-49.43	129.88	48.47	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h12qjEqA	-49.97	129.88	48.47	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h12qjFqA	-44.92	129.61	47.69	58.35	67.37	74.91	86.32	94.29	107.98
c6h12qjAqB	-49.43	128.50	48.48	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h12qjBqB	-57.26	121.56	46.41	57.53	67.24	75.40	87.30	95.15	109.59
c6h12qjCqB	-54.47	127.38	48.85	59.93	69.05	76.50	87.57	95.28	108.49
c6h12qjDqB	-54.47	127.38	48.85	59.94	69.05	76.50	87.57	95.29	108.49
c6h12qjEqB	-55.01	127.38	48.85	59.93	69.05	76.50	87.57	95.29	108.49
c6h12qjFqB	-49.97	129.87	48.48	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h12qjAqC	-49.43	128.50	48.48	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h12qjBqC	-54.47	127.38	48.85	59.93	69.05	76.50	87.57	95.29	108.49
c6h12qjCqC	-57.26	121.56	46.40	57.54	67.24	75.40	87.30	95.16	109.60
c6h12qjDqC	-53.93	128.76	48.85	59.94	69.05	76.50	87.57	95.29	108.49
c6h12qjEqC	-54.47	128.76	48.85	59.93	69.05	76.50	87.57	95.29	108.49
c6h12qjFqC	-49.43	128.50	48.48	58.88	68.04	75.80	87.26	94.72	108.23
c6h11oAqA	-101.31	118.15	39.92	50.24	58.85	66.00	76.91	85.00	105.62
c6h11oAqB	-82.95	120.35	42.86	52.84	61.24	68.24	78.90	86.49	103.06
c6h11oAqC	-84.44	120.55	43.68	53.28	61.35	68.08	78.41	85.97	103.61
c6h11oAqD	-84.44	120.55	43.68	53.28	61.35	68.08	78.41	85.97	103.61
c6h11oAqE	-84.98	120.55	43.68	53.28	61.35	68.08	78.41	85.97	103.61
c6h11oAqF	-79.93	121.67	43.08	52.51	60.52	67.28	77.77	85.46	101.98
c6h11oBqA	-86.16	120.39	43.31	52.53	60.39	67.03	77.41	85.17	102.85
c6h11oBqC	-90.10	119.47	42.38	52.02	60.47	67.76	79.01	86.07	87.67
c6h11oBqD	-91.59	119.67	43.02	52.64	60.76	67.59	78.11	85.80	103.03
c6h11oBqE	-92.13	119.67	43.02	52.64	60.76	67.59	78.11	85.80	103.03
c6h11oBqF	-87.08	120.78	42.42	51.88	59.94	66.78	77.46	85.31	101.34
c6h11oCqA	-87.37	120.89	42.94	52.43	60.41	67.09	77.40	85.17	104.97
c6h11oCqB	-90.39	119.57	42.72	52.76	61.13	68.05	78.52	86.20	106.08
c6h11oCqD	-90.39	119.57	42.72	52.76	61.13	68.05	78.52	86.20	106.08
c6h11oCqE	-92.42	119.77	43.53	53.20	61.24	67.89	78.04	85.67	106.53
c6h11oCqF	-87.37	120.89	42.94	52.43	60.41	67.09	77.40	85.17	104.92
c6h12o#3	-42.00	89.32	35.27	44.83	53.08	60.10	70.87	78.39	91.08
c6h12o#4	-44.14	89.28	32.50	43.07	51.71	58.95	70.80	80.64	95.73
c6h12o#5	-64.51	83.03	37.30	47.59	55.99	62.83	73.13	80.60	93.04
c6h12o-AB	-37.49	94.57	34.66	44.08	52.25	59.27	70.25	77.84	87.37
c6h12o-BC	-42.54	92.08	35.26	44.84	53.08	60.08	70.90	78.34	89.10
c6h12o-CD	-42.00	89.32	35.26	44.84	53.08	60.08	70.90	78.34	89.10
c6h12o-AC	-44.14	89.28	32.50	43.07	51.71	58.95	70.80	80.64	95.73
c6h12o-BD	-44.14	89.28	32.50	43.07	51.71	58.95	70.80	80.64	95.73
c6h12o-BE	-63.97	83.03	37.32	47.56	55.99	62.87	73.11	80.64	101.60
c6h12o-AD	-58.39	88.27	36.71	46.80	55.16	62.06	72.47	80.15	100.19
c6h12o-AE	-64.33	82.87	36.71	46.80	55.16	62.06	72.47	80.15	100.19
c6oBrE	-20.48	102.27	34.56	42.61	49.43	55.26	64.63	71.91	86.20
c6oArD	-13.33	103.15	35.32	43.46	50.20	55.86	64.90	71.97	86.59
c6oCrF	-18.56	102.21	35.22	43.55	50.42	56.13	65.13	72.25	90.22
c6h12o#6	-64.33	82.87	36.71	46.82	55.16	62.04	72.49	80.11	92.77
nc6h13o2h	-65.07	113.56	42.60	52.42	61.29	68.98	80.67	88.61	103.36
c6h11o2h	-37.88	110.39	40.02	48.65	56.50	63.36	73.89	81.03	94.05
c5h11hco	-59.29	101.00	35.82	44.28	51.66	58.09	68.47	76.21	87.89
c5h11co	-22.39	102.12	34.99	42.85	49.70	55.67	65.31	72.48	83.25
hexanone	-67.08	100.02	34.78	43.50	51.08	57.62	68.12	76.03	89.58
c6h7C	56.25	70.73	26.92	34.59	40.56	45.27	52.17	57.05	64.23
Lc6h7	98.34	82.79	27.50	34.43	39.96	44.35	50.48	54.26	61.33
Lc6h6	82.63	81.39	26.49	32.89	38.11	42.30	48.13	51.58	57.73
Lc6h4	125.73	79.68	24.84	30.14	34.42	37.80	42.38	44.92	49.21
U-c6h5	140.96	79.55	26.90	31.87	36.27	40.04	45.65	48.93	53.93
Dc6h11-1	36.53	93.82	31.47	39.36	46.03	51.67	60.63	67.44	79.39
Ec6h11-1	36.93	93.82	31.36	39.18	45.84	51.55	60.68	67.50	78.12
nc7h16	-45.01	102.27	39.81	50.53	60.01	68.27	81.46	91.24	108.79
Ac7h15	3.80	105.74	39.74	50.02	58.87	66.47	78.54	87.58	103.41
Bc7h15	1.60	105.90	39.59	49.64	58.37	65.90	77.97	87.13	103.78
Cc7h15	1.60	105.90	39.69	49.84	58.55	66.01	77.94	87.02	103.58
Dc7h15	1.60	104.52	39.69	49.84	58.55	66.01	77.94	87.02	103.58
c7h14-1	-15.00	101.72	36.86	46.56	55.70	63.60	74.89	82.95	94.93
c7h14-2	-17.84	101.04	36.75	46.65	55.25	62.71	74.71	83.60	97.06
c7h14-3	-17.67	101.42	36.43	46.55	55.29	62.83	74.86	83.74	97.21
c7h12-13	8.36	95.48	35.08	44.56	52.65	59.48	69.94	77.14	88.89
c7h12-16	15.25	100.19	34.23	43.55	51.51	58.30	68.98	76.73	88.45
Cc7h13-1	31.16	105.84	35.96	45.27	53.35	60.34	71.56	79.86	92.41
Dc7h13-1	31.45	108.50	35.44	44.73	52.84	59.90	71.26	79.64	92.02
Ec7h13-1	31.45	108.50	35.44	44.73	52.84	59.90	71.26	79.64	92.02

Fc7h13-1	31.45	108.50	35.44	44.73	52.84	59.90	71.26	79.64	92.02
Dc7h13-2	12.72	98.41	36.26	45.26	53.17	60.10	71.44	79.95	92.87
Ec7h13-3	12.64	96.82	35.74	45.08	53.21	60.27	71.66	80.04	92.98
Ac7h13-3	31.33	108.40	35.65	45.17	53.38	60.45	71.71	80.00	92.56
c7h14rohAB	-34.21	116.69	42.57	53.24	62.25	69.89	82.06	91.14	106.12
c7h14qjohA	-70.22	129.64	49.33	61.00	71.13	79.80	93.16	101.75	106.34
c7h14rohBC	-39.26	115.58	43.33	53.85	62.91	70.71	83.06	91.41	94.93
c7h14qjohB	-75.26	128.52	49.74	61.96	72.15	80.59	93.38	102.51	122.93
c7h14rohCD	-38.72	115.58	43.32	53.86	62.92	70.71	83.06	91.42	94.93
c7h14qjohC	-74.72	128.52	49.74	61.96	72.15	80.59	93.38	102.51	122.88
c7h15qjA	-29.87	119.58	45.51	56.95	66.75	75.08	88.07	97.30	112.47
c7h15qjB	-34.91	118.47	46.26	57.57	67.42	75.90	89.07	97.58	101.28
c7h15qjC	-34.37	118.46	46.27	57.56	67.41	75.90	89.07	97.57	101.28
c7h15qjD	-34.37	117.09	46.27	57.56	67.41	75.90	89.07	97.57	101.28
c7h14rAqA	-22.07	126.29	47.13	58.13	67.34	75.11	87.30	96.22	111.04
c7h14rBqA	-18.37	126.30	47.16	58.16	67.38	75.15	87.33	96.24	111.06
c7h14rCqA	-18.37	126.30	47.16	58.16	67.38	75.15	87.33	96.24	111.06
c7h14rDqA	-18.37	126.30	47.16	58.16	67.38	75.15	87.33	96.24	111.06
c7h14rEqA	-18.37	126.30	47.16	58.16	67.38	75.15	87.33	96.24	111.06
c7h14rFqA	-18.37	126.30	47.06	57.96	67.20	75.04	87.36	96.35	111.26
c7h14rGqA	-16.17	126.14	47.21	58.34	67.71	75.61	87.93	96.82	111.55
c7h14rAqB	-21.91	125.02	47.96	58.95	68.38	76.43	88.93	97.10	100.36
c7h14rBqB	-29.11	124.27	47.79	58.44	67.59	75.44	87.79	96.08	99.56
c7h14rCqB	-23.41	125.18	47.91	58.77	68.05	75.97	88.33	96.52	99.85
c7h14rDqB	-23.41	125.18	47.91	58.77	68.05	75.97	88.33	96.52	99.85
c7h14rEqB	-23.41	125.18	47.91	58.77	68.05	75.97	88.33	96.52	99.85
c7h14rFqB	-23.41	125.18	47.82	58.56	67.87	75.87	88.37	96.63	100.06
c7h14rGqB	-21.21	125.02	47.96	58.95	68.38	76.43	88.93	97.10	100.36
c7h14rAqC	-20.67	125.02	47.96	58.94	68.38	76.44	88.93	97.09	100.36
c7h14rBqC	-22.87	125.18	47.81	58.57	67.87	75.86	88.36	96.63	100.05
c7h14rCqC	-28.57	124.27	47.89	58.64	67.77	75.54	87.76	95.96	99.36
c7h14rDqC	-22.87	125.18	47.91	58.77	68.05	75.97	88.33	96.52	99.85
c7h14rEqC	-22.87	125.18	47.91	58.77	68.05	75.97	88.33	96.52	99.85
c7h14rFqC	-22.87	125.18	47.81	58.57	67.87	75.86	88.36	96.63	100.05
c7h14rGqC	-20.67	125.02	47.96	58.94	68.38	76.44	88.93	97.09	100.36
c7h14rAqD	-20.67	125.02	47.96	58.94	68.38	76.44	88.93	97.09	100.36
c7h14rBqD	-22.87	125.18	47.81	58.57	67.87	75.86	88.36	96.63	100.05
c7h14rCqD	-22.87	125.18	47.91	58.77	68.05	75.97	88.33	96.52	99.85
c7h14rDqD	-28.57	122.89	47.89	58.64	67.77	75.54	87.76	95.96	99.36
c7h14qjAqA	-58.05	134.74	51.70	64.26	74.95	83.93	97.33	105.62	110.91
c7h14qjBqA	-54.37	137.86	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjCqA	-54.37	137.86	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjDqA	-54.37	137.86	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjEqA	-54.37	137.86	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.86	111.26
c7h14qjFqA	-54.91	137.86	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.86	111.26
c7h14qjGqA	-49.87	140.35	53.16	65.32	75.60	84.24	97.42	106.59	122.46
c7h14qjAqB	-54.37	139.24	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjBqB	-62.21	130.92	51.84	64.58	75.47	84.65	98.48	107.27	114.25
c7h14qjCqB	-59.42	136.74	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjDqB	-59.42	138.12	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjEqB	-59.42	138.12	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjFqB	-59.96	138.12	54.32	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.24
c7h14qjGqB	-54.91	137.86	53.90	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjAqC	-54.37	139.24	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjBqC	-59.42	138.12	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjCqC	-62.21	132.30	51.84	64.58	75.47	84.64	98.48	107.27	114.25
c7h14qjDqC	-58.88	136.74	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjEqC	-58.88	136.74	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjFqC	-59.42	136.74	54.32	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.24
c7h14qjGqC	-54.37	139.23	53.90	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjAqD	-54.37	137.86	53.91	65.93	76.27	85.06	98.42	106.87	111.26
c7h14qjBqD	-59.42	138.12	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjCqD	-58.88	138.12	54.33	66.88	77.29	85.85	98.64	107.61	128.18
c7h14qjDqD	-62.21	130.92	51.84	64.58	75.47	84.64	98.48	107.27	114.25
c7h14o#3	-47.48	101.44	40.73	51.79	61.33	69.44	81.94	90.74	105.63
c7h14o#4	-48.54	95.88	37.97	50.02	59.95	68.30	81.87	92.98	110.40
c7h14o#5	-68.92	95.14	42.77	54.55	64.23	72.18	84.21	92.94	107.59
c7h14o#6	-74.32	89.74	42.76	54.55	64.23	72.18	84.20	92.95	107.58
c7h14o-AB	-42.43	103.93	40.13	51.04	60.50	68.61	81.33	90.18	102.04
c7h14o-AC	-42.45	101.61	37.38	49.37	59.47	67.94	81.03	90.34	104.29
c7h14o-AD	-63.33	97.63	42.17	53.77	63.41	71.40	83.54	92.49	115.02
c7h14o-AE	-68.73	92.23	42.17	53.77	63.41	71.40	83.54	92.49	115.02
c7h14o-BC	-47.48	101.44	40.73	51.80	61.32	69.42	81.97	90.67	103.77
c7h14o-BD	-46.82	100.98	38.30	50.22	60.24	68.63	81.52	90.65	104.29
c7h14o-BE	-68.38	95.14	42.79	54.52	64.23	72.21	84.19	92.98	116.43
c7h14o-BF	-74.32	89.74	42.79	54.52	64.23	72.21	84.19	92.98	116.43
c7h14o-CD	-46.94	101.44	40.73	51.80	61.32	69.42	81.97	90.67	103.77
c7h14o-CE	-46.82	100.98	38.30	50.22	60.24	68.63	81.52	90.65	104.29
nc7h15o2h	-70.02	122.91	48.07	59.36	69.52	78.33	91.76	100.95	117.91
c7h13o2h	-42.83	119.75	45.50	55.59	64.74	72.71	84.98	93.36	108.60
c7h13oAqA	-106.26	127.51	45.39	57.20	67.10	75.35	87.99	97.33	120.36
c7h13oAqB	-87.90	129.71	48.33	59.80	69.48	77.59	89.97	98.83	117.78
c7h13oAqC	-89.39	129.91	49.15	60.23	69.59	77.43	89.49	98.30	118.24
c7h13oAqD	-89.39	129.91	49.15	60.23	69.59	77.43	89.49	98.30	118.24
c7h13oAqE	-89.39	129.91	49.15	60.23	69.59	77.43	89.49	98.30	118.24
c7h13oAqF	-89.93	129.91	49.15	60.23	69.59	77.43	89.49	98.30	118.31
c7h13oAqG	-84.88	131.02	48.55	59.47	68.76	76.62	88.85	97.80	116.56
c7h13oBqA	-91.11	129.74	48.77	59.50	68.63	76.37	88.48	97.51	117.49
c7h13oBqC	-95.05	128.82	47.85	58.97	68.71	77.11	90.09	98.40	101.91
c7h13oBqD	-96.53	129.02	48.49	59.59	69.01	76.93	89.18	98.14	117.67
c7h13oBqE	-96.53	129.02	48.49	59.59	69.01	76.93	89.18	98.14	117.67
c7h13oBqF	-97.07	129.02	48.49	59.59	69.01	76.93	89.18	98.14	117.67
c7h13oBqG	-92.03	130.14	47.89	58.84	68.18	76.12	88.54	97.64	116.00
c7h13oCqA	-92.32	130.24	48.40	59.39	68.66	76.43	88.47	97.51	119.64
c7h13oCqB	-95.33	128.92	48.17	59.73	69.38	77.39	89.59	98.55	120.76
c7h13oCqD	-95.33	128.92	48.18	59.73	69.38	77.39	89.59	98.54	120.75
c7h13oCqE	-96.82	129.12	49.00	60.16	69.48	77.24	89.11	98.01	121.27
c7h13oCqF	-97.36	129.12	49.00	60.16	69.48	77.24	89.11	98.01	121.27
c7h13oCqG	-92.32	130.24	48.40	59.39	68.66	76.43	88.47	97.51	119.64
c7h13oDqA	-92.32	130.24	48.40	59.39	68.66	76.43	88.47	97.51	119.64
c7h13oDqB	-97.36	129.12	49.00	60.16	69.48	77.24	89.11	98.01	121.27
c7h13oDqC	-95.33	128.92	48.18	59.73	69.38	77.39	89.59	98.54	120.75
c6h13hco	-64.88	110.26	40.91	51.10	59.90	67.47	79.50	88.53	104.09
c6h13co	-45.12	108.66	37.92	46.02	52.56	57.81	65.42	70.60	79.37
heptanone	-72.03	109.38	40.24	50.47	59.33	66.97	79.19	88.38	104.14
c6h11hco	-37.77	106.88	37.83	47.12	55.14	62.04	72.97	81.02	95.75
c6h11co	-2.46	108.35	36.86	45.44	52.82	59.14	69.23	76.75	90.73
p2c4h614	29.72	101.64	36.46	46.54	54.94	61.96	72.74	80.36	92.86
p2c4h513	8.00	93.90	35.59	45.30	53.49	60.32	70.60	77.52	89.20
P2c4h4134	38.91	93.22	34.94	43.91	51.38	57.59	67.00	73.51	84.63
c7h15qA	-64.97	124.03	47.28	58.86	68.85	77.41	90.85	100.46	116.30
c7h15qB	-70.02	122.91	48.03	59.47	69.52	78.23	91.85	100.74	105.14
c7h15qC	-69.48	122.91	48.03	59.47	69.52	78.23	91.85	100.74	105.14
c7h15qD	-69.48	121.54	48.03	59.47	69.52	78.23	91.85	100.74	105.14

c7h15ojA	-29.51	111.37	40.96	52.11	61.69	69.89	82.84	92.24	107.56
c7h15ojB	-32.46	110.26	41.72	52.71	62.35	70.71	83.85	92.51	96.36
c7h15ojC	-31.92	110.25	41.72	52.71	62.35	70.71	83.84	92.51	96.36
c7h15ojD	-31.92	108.87	41.72	52.71	62.35	70.71	83.84	92.51	96.36
nc8h18	-49.89	111.70	45.09	56.93	68.33	78.32	92.82	103.25	118.90
Ac8h17	-1.16	115.03	45.24	56.96	67.10	75.81	89.64	99.97	118.09
Bc8h17	-3.36	115.19	45.09	56.57	66.59	75.24	89.07	99.52	118.47
Cc8h17	-3.36	115.19	45.19	56.79	66.77	75.34	89.03	99.41	118.28
Dc8h17	-3.36	115.19	45.19	56.79	66.77	75.34	89.03	99.41	118.28
c8h16-1	-19.98	111.10	42.29	53.48	64.01	73.08	85.91	95.00	108.35
c8h16-2	-22.73	109.46	42.53	53.66	63.45	71.99	85.79	95.94	111.41
c8h16-3	-22.81	109.24	42.01	53.49	63.50	72.17	86.00	96.04	111.52
c8h16-4	-22.81	107.87	42.01	53.49	63.50	72.17	86.00	96.04	111.52
c8h14	-48.56	93.88	30.74	37.50	43.51	48.78	57.15	63.17	73.61
Cc8h15-1	11.53	109.04	41.70	52.54	61.97	70.14	83.17	92.66	107.42
Dc8h15-2	7.77	107.75	41.74	52.22	61.41	69.45	82.53	92.28	107.11
Ec8h15-3	7.69	107.47	41.22	52.03	61.45	69.62	82.75	92.37	107.22
Hc8h15-1	29.17	116.09	41.75	52.69	62.12	70.22	83.11	92.55	106.79
c8h16rohAB	-39.16	126.06	48.05	60.19	70.48	79.23	93.15	103.46	120.36
c8h16rohBC	-44.20	124.94	48.80	60.80	71.15	80.06	94.14	103.74	109.17
c8h16rohCD	-43.66	124.94	48.80	60.80	71.15	80.06	94.14	103.74	109.17
c8h16rohDE	-43.66	124.94	48.80	60.80	71.15	80.06	94.14	103.74	109.17
c8h16qjohA	-75.16	139.00	54.79	67.96	79.37	89.14	104.24	114.08	120.58
c8h16qjohB	-80.21	137.88	55.21	68.91	80.39	89.94	104.45	114.85	137.61
c8h16qjohC	-79.67	137.88	55.21	68.91	80.39	89.94	104.45	114.85	137.61
c8h16qjohD	-79.67	137.88	55.21	68.91	80.39	89.94	104.45	114.85	137.61
c8h17qjA	-34.81	128.94	50.99	63.89	75.00	84.45	99.13	109.69	127.66
c8h17qjB	-39.86	127.83	51.77	64.42	75.67	85.34	100.06	110.12	127.91
c8h17qjC	-39.32	127.82	51.77	64.42	75.67	85.34	100.06	110.12	127.91
c8h17qjD	-39.32	127.82	51.77	64.42	75.67	85.34	100.06	110.12	127.91
c8h16rAqA	-27.01	135.65	52.62	65.05	75.58	84.48	98.36	108.61	126.23
c8h16rBqA	-23.31	135.66	52.64	65.10	75.63	84.51	98.39	108.63	126.25
c8h16rCqA	-23.31	135.66	52.64	65.10	75.63	84.51	98.39	108.63	126.25
c8h16rDqA	-23.31	135.66	52.64	65.10	75.63	84.51	98.39	108.63	126.25
c8h16rEqA	-23.31	135.66	52.65	65.09	75.63	84.52	98.39	108.62	126.25
c8h16rFqA	-23.31	135.66	52.65	65.09	75.63	84.52	98.39	108.62	126.25
c8h16rGqA	-23.31	135.66	52.54	64.89	75.44	84.41	98.43	108.74	126.45
c8h16rHqA	-21.11	135.50	52.69	65.26	75.95	84.98	99.00	109.20	126.75
c8h16rAqB	-26.86	134.38	53.47	65.80	76.62	85.88	99.93	109.63	127.01
c8h16rBqB	-34.06	133.63	53.30	65.29	75.83	84.88	98.79	108.62	126.21
c8h16rCqB	-28.36	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rDqB	-28.36	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rEqB	-28.36	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rFqB	-28.36	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rGqB	-28.36	134.54	53.32	65.43	76.12	85.30	99.36	109.17	126.71
c8h16rHqB	-26.16	134.38	53.47	65.80	76.62	85.88	99.93	109.63	127.01
c8h16rAqC	-25.62	134.38	53.47	65.80	76.62	85.88	99.93	109.63	127.01
c8h16rBqC	-27.82	134.54	53.32	65.43	76.12	85.30	99.36	109.17	126.71
c8h16rCqC	-33.52	133.63	53.40	65.50	76.01	84.98	98.75	108.51	126.02
c8h16rDqC	-27.82	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rEqC	-27.82	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rFqC	-27.82	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rGqC	-27.82	134.54	53.32	65.43	76.12	85.30	99.36	109.17	126.71
c8h16rHqC	-25.62	134.38	53.47	65.80	76.62	85.88	99.93	109.63	127.01
c8h16rAqD	-25.62	134.38	53.47	65.80	76.62	85.88	99.93	109.63	127.01
c8h16rBqD	-27.82	134.54	53.32	65.43	76.12	85.30	99.36	109.17	126.71
c8h16rCqD	-27.82	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rDqD	-33.52	133.63	53.40	65.50	76.01	84.98	98.75	108.51	126.02
c8h16rEqD	-27.82	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rFqD	-27.82	134.54	53.42	65.63	76.30	85.41	99.32	109.06	126.51
c8h16rGqD	-27.82	134.54	53.32	65.43	76.12	85.30	99.36	109.17	126.71
c8h16rHqD	-25.62	134.38	53.47	65.80	76.62	85.88	99.93	109.63	127.01
c8h16qjAqA	-63.00	144.10	57.20	71.13	83.21	93.36	108.32	118.16	136.01
c8h16qjBqA	-59.32	147.22	59.42	72.78	84.51	94.50	109.42	119.40	137.35
c8h16qjCqA	-59.32	147.22	59.42	72.78	84.51	94.50	109.42	119.40	137.35
c8h16qjDqA	-59.32	148.60	59.42	72.78	84.51	94.50	109.42	119.40	137.35
c8h16qjEqA	-59.32	148.60	59.42	72.79	84.52	94.50	109.42	119.41	137.34
c8h16qjFqA	-59.32	148.60	59.41	72.79	84.52	94.50	109.41	119.41	137.34
c8h16qjGqA	-59.86	148.60	59.41	72.79	84.52	94.50	109.42	119.41	137.35
c8h16qjHqA	-54.81	148.33	58.64	72.25	83.85	93.61	108.49	118.97	137.09
c8h16qjAqB	-59.32	147.22	59.42	72.78	84.51	94.50	109.42	119.40	137.35
c8h16qjBqB	-67.16	140.28	57.36	71.43	83.71	94.09	109.47	119.83	138.71
c8h16qjCqB	-64.37	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjDqB	-64.37	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjEqB	-64.37	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjFqB	-64.37	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.72	119.96	137.61
c8h16qjGqB	-64.91	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjHqB	-59.86	148.59	59.42	72.78	84.52	94.50	109.42	119.40	137.34
c8h16qjAqC	-59.32	147.22	59.42	72.78	84.52	94.50	109.42	119.40	137.34
c8h16qjBqC	-64.37	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjCqC	-67.16	140.28	57.36	71.43	83.71	94.09	109.47	119.83	138.71
c8h16qjDqC	-63.83	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjEqC	-63.83	147.48	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjFqC	-63.83	147.48	59.79	73.84	85.53	95.19	109.72	119.96	137.61
c8h16qjGqC	-64.37	147.48	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjHqC	-59.32	147.22	59.42	72.78	84.52	94.50	109.42	119.40	137.34
c8h16qjAqD	-59.32	147.22	59.42	72.78	84.52	94.50	109.42	119.40	137.34
c8h16qjBqD	-64.37	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjCqD	-63.83	146.10	59.79	73.84	85.53	95.19	109.72	119.96	137.61
c8h16qjDqD	-67.16	140.28	57.36	71.43	83.71	94.09	109.47	119.83	138.71
c8h16qjEqD	-63.83	147.48	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjFqD	-63.83	147.48	59.79	73.84	85.53	95.19	109.72	119.96	137.61
c8h16qjGqD	-64.37	147.48	59.79	73.84	85.53	95.19	109.71	119.96	137.61
c8h16qjHqD	-59.32	147.22	59.42	72.78	84.52	94.50	109.42	119.40	137.34
c8h16o-AB	-47.38	113.29	45.75	57.84	68.58	77.97	92.77	102.29	103.43
c8h16o-BC	-52.43	110.79	46.19	58.76	69.57	78.77	93.04	103.02	118.43
c8h16o-CD	-51.89	110.79	46.19	58.76	69.57	78.77	93.04	103.02	118.43
c8h16o-DE	-51.89	108.04	46.19	58.76	69.57	78.77	93.04	103.02	118.43
c8h16o-AC	-48.98	110.49	42.86	56.14	67.38	76.91	92.24	104.99	139.42
c8h16o-BD	-48.98	110.49	42.86	56.14	67.38	76.91	92.24	104.99	139.42
c8h16o-CE	-48.98	110.49	42.86	56.14	67.38	76.91	92.24	104.99	139.42
c8h16o#4	-53.49	107.99	43.43	56.98	68.20	77.64	92.94	105.32	125.04
c8h16o-AD	-68.28	106.99	47.65	60.71	71.65	80.75	94.62	104.82	129.79
c8h16o-BE	-73.33	104.49	48.24	61.48	72.48	81.55	95.25	105.32	131.29
c8h16o-CF	-72.79	101.74	48.24	61.48	72.48	81.55	95.25	105.32	131.29
c8h16o-AE	-73.68	101.59	47.65	60.71	71.65	80.75	94.62	104.82	129.79
c8h16o-BF	-78.73	99.09	48.24	61.48	72.48	81.55	95.25	105.32	131.29
c8h16o#5	-73.33	101.74	48.24	61.50	72.47	81.53	95.28	105.27	122.15
c8h16o#6	-79.27	99.09	48.24	61.50	72.47	81.53	95.28	105.27	122.15
c8h17qA	-69.92	133.39	52.75	65.81	77.09	86.75	101.93	112.80	130.54
c8h17qB	-74.97	132.27	53.50	66.42	77.76	87.57	102.93	113.07	119.39
c8h17qC	-74.43	132.27	53.50	66.42	77.76	87.57	102.93	113.07	119.39
c8h17qD	-74.43	132.27	53.50	66.42	77.76	87.57	102.93	113.07	119.39
c8h17ojA	-34.46	120.73	46.43	59.06	69.93	79.23	93.93	104.57	121.79

c8h17ojB	-37.40	119.62	47.19	59.67	70.59	80.05	94.93	104.84	110.61
c8h17ojC	-36.86	119.61	47.19	59.66	70.59	80.06	94.93	104.84	110.61
c8h17ojD	-36.86	119.61	47.19	59.66	70.59	80.06	94.93	104.84	110.61
nc8h17o2h	-74.97	132.27	53.54	66.32	77.77	87.68	102.83	113.29	132.47
c8h15o2h	-45.02	129.94	50.96	62.85	73.50	82.68	96.60	106.05	123.40
c8h15oq	-59.81	129.96	56.06	71.32	84.72	96.33	114.70	128.27	152.59
c8h15oAqB	-92.85	139.06	54.03	66.52	77.48	86.95	101.60	110.82	112.83
c8h15oAqC	-94.33	139.26	54.61	67.19	77.83	86.77	100.56	110.64	133.00
c8h15oAqD	-94.33	139.26	54.61	67.19	77.83	86.77	100.56	110.64	133.00
c8h15oAqE	-94.33	139.26	54.61	67.19	77.83	86.77	100.56	110.64	133.00
c8h15oBqA	-96.05	139.10	54.24	66.45	76.88	85.72	99.56	109.85	132.18
c8h15oBqC	-99.99	138.18	53.32	65.93	76.95	86.45	101.18	110.73	116.15
c8h15oBqD	-101.48	138.38	53.96	66.55	77.25	86.27	100.26	110.47	132.33
c8h15oBqE	-101.48	138.38	53.96	66.55	77.25	86.27	100.26	110.47	132.33
c8h15oBqF	-101.48	138.38	53.96	66.55	77.25	86.27	100.26	110.47	132.33
c8h15oCqA	-97.26	139.60	53.87	66.35	76.90	85.77	99.55	109.85	134.33
c8h15oCqB	-100.28	138.28	53.65	66.68	77.62	86.74	100.67	110.87	135.45
c8h15oCqD	-100.28	138.28	53.65	66.68	77.62	86.74	100.67	110.87	135.52
c8h15oCqE	-101.77	138.48	54.47	67.11	77.72	86.58	100.19	110.34	135.94
c8h15oCqF	-101.77	138.48	54.47	67.11	77.72	86.58	100.19	110.34	135.94
c8h15oCqG	-102.31	138.48	54.47	67.11	77.72	86.58	100.19	110.34	135.94
c8h15oDqA	-97.26	139.60	53.87	66.35	76.90	85.77	99.55	109.85	134.33
c8h15oDqB	-102.31	138.48	54.47	67.12	77.73	86.58	100.18	110.35	136.03
c8h15oDqC	-100.28	138.28	53.64	66.69	77.63	86.74	100.66	110.88	135.48
c8h15oDqE	-100.28	138.28	53.65	66.68	77.62	86.74	100.67	110.87	135.44
c8h15oDqF	-101.77	138.48	54.47	67.11	77.72	86.58	100.19	110.34	135.94
c8h15oDqG	-102.31	138.48	54.47	67.11	77.72	86.58	100.19	110.34	135.94
c8h15oDqH	-97.26	139.60	53.87	66.35	76.90	85.77	99.55	109.85	134.35
c7h15hco	-69.83	119.62	46.38	58.06	68.15	76.81	90.57	100.87	118.64
c7h15co	-45.12	108.66	37.92	46.02	52.56	57.81	65.42	70.60	79.37
octanone	-76.97	118.73	45.72	57.41	67.56	76.32	90.26	100.71	118.68
c7h14hco-5	-23.22	121.88	46.25	57.38	66.69	74.54	87.05	96.65	115.93
oct1*o4oo	-59.23	134.82	52.84	65.30	75.74	84.44	97.78	107.49	129.25
oct1*o2j4o	-52.03	137.33	54.52	66.70	76.79	85.16	98.01	107.51	129.07
oct1*o2oo4	-82.25	154.27	60.26	74.00	85.32	94.57	108.25	117.79	140.50
oct1*o4*o2	-120.19	145.27	54.94	67.28	77.51	85.95	98.72	108.19	133.45
c4h9coc3h6	-28.46	120.94	46.16	57.47	66.91	74.82	87.28	96.93	119.59
nc4h9coc3h	-28.46	120.94	46.16	57.47	66.91	74.82	87.28	96.93	119.59
nc4h9coc3h	-62.16	135.16	52.10	64.45	74.80	83.44	96.76	106.69	130.65
nc4h9coc3h	-97.26	139.60	53.87	66.35	76.90	85.77	99.55	109.85	134.35
nc4h9coc3h	-61.80	126.95	47.56	59.59	69.73	78.25	91.55	101.62	125.39
c2h3coc3h7	-40.65	98.03	32.97	40.89	47.67	53.47	62.68	69.45	79.78
c2h3coc3h6	1.65	96.87	33.24	40.98	47.48	52.92	61.30	67.26	76.14
c2h3coc3h6	5.70	102.47	31.30	38.52	44.77	50.17	58.79	65.08	74.27
c2h3coc4h9	-45.58	107.45	38.48	47.87	55.92	62.81	73.75	81.80	94.04
c2h3coc4h8	-3.28	106.29	38.82	48.00	55.74	62.25	72.34	79.57	90.38
c2h3coc4h8	.77	111.89	36.79	45.49	53.01	59.50	69.84	77.38	88.50
c2h3coc5h1	-50.51	116.87	43.99	54.85	64.16	72.14	84.82	94.14	108.31
c2h3coc5h1	-8.21	115.71	44.33	54.98	63.99	71.59	83.41	91.92	104.65
c2h3coc5h1	-4.16	121.31	42.28	52.46	61.26	68.83	80.90	89.72	102.78
c2h3coc6h1	-55.44	126.29	49.50	61.82	72.40	81.47	95.88	106.49	122.57
c2h3coc6h1	-13.14	125.13	49.84	61.96	72.23	80.92	94.48	104.26	118.91
c2h3coc6h1	-9.09	130.73	47.73	59.42	69.52	78.21	92.03	102.10	116.94
nc9h20	-54.71	121.04	50.53	63.84	76.62	87.77	103.77	115.26	132.02
Ac9h19	-8.85	126.06	50.35	63.06	75.23	85.89	101.50	112.88	130.41
Bc9h19	-8.26	124.24	50.37	63.47	74.83	84.61	100.14	111.82	133.03
Cc9h19	-8.26	124.24	50.48	63.67	75.01	84.72	100.11	111.70	132.84
Dc9h19	-8.26	124.24	50.48	63.67	75.01	84.72	100.11	111.70	132.84
Ec9h19	-8.26	122.87	50.48	63.67	75.01	84.72	100.11	111.70	132.84
c9h18-1	-24.92	119.65	48.00	60.93	72.20	81.95	97.42	108.60	125.89
c9h18-2	-27.68	118.82	48.00	60.62	71.69	81.34	96.87	108.27	125.64
c9h18-3	-27.75	118.60	47.49	60.43	71.73	81.51	97.09	108.36	125.75
c9h18-4	-27.75	118.60	47.49	60.43	71.73	81.51	97.09	108.36	125.76
Cc9h17-1	6.58	118.42	47.17	59.50	70.22	79.48	94.26	105.00	121.66
Dc9h17-2	2.82	117.11	47.21	59.17	69.64	78.79	93.62	104.61	121.34
Ec9h17-3	2.75	116.79	46.70	58.99	69.69	78.97	93.84	104.70	121.46
Fc9h17-4	2.75	115.43	46.69	59.00	69.70	78.96	93.83	104.71	121.46
c9h16	-48.56	93.88	30.74	37.50	43.51	48.78	57.15	63.17	73.61
c9h19qjA	-39.76	138.30	56.45	70.87	83.23	93.77	110.23	121.97	140.94
c9h19qjB	-44.81	137.19	57.24	71.37	83.90	94.69	111.14	122.46	142.47
c9h19qjC	-44.27	137.19	57.24	71.38	83.91	94.69	111.14	122.46	142.47
c9h19qjD	-44.27	137.18	57.24	71.38	83.91	94.69	111.14	122.46	142.47
c9h19qjE	-44.27	135.81	57.24	71.38	83.91	94.69	111.14	122.46	142.47
c9h18rAqA	-31.96	145.01	58.09	72.00	83.82	93.83	109.44	120.94	140.80
c9h18rBqA	-28.26	145.02	58.12	72.04	83.86	93.87	109.47	120.96	140.81
c9h18rCqA	-28.26	145.02	58.12	72.04	83.86	93.87	109.47	120.96	140.81
c9h18rDqA	-28.26	145.02	58.12	72.04	83.86	93.87	109.47	120.96	140.81
c9h18rEqA	-28.26	145.02	58.12	72.04	83.87	93.86	109.47	120.97	140.80
c9h18rFqA	-28.26	145.02	58.12	72.04	83.87	93.86	109.47	120.97	140.80
c9h18rGqA	-28.26	145.02	58.12	72.04	83.87	93.86	109.47	120.97	140.80
c9h18rHqA	-28.26	145.02	58.01	71.85	83.69	93.75	109.50	121.09	141.00
c9h18rIqA	-26.06	144.86	58.16	72.22	84.20	94.33	110.07	121.55	141.31
c9h18rAqB	-31.81	143.74	58.94	72.76	84.87	95.22	111.00	121.98	141.57
c9h18rBqB	-39.01	142.99	58.78	72.24	84.07	94.23	109.87	120.95	140.77
c9h18rCqB	-33.31	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rDqB	-33.31	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rEqB	-33.31	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rFqB	-33.31	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rGqB	-33.31	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rHqB	-33.31	143.90	58.80	72.37	84.35	94.65	110.44	121.51	141.27
c9h18rIqB	-31.11	143.74	58.95	72.74	84.86	95.23	111.01	121.97	141.57
c9h18rAqC	-30.57	143.74	58.95	72.74	84.86	95.23	111.01	121.97	141.57
c9h18rBqC	-32.77	143.90	58.80	72.37	84.35	94.65	110.44	121.51	141.27
c9h18rCqC	-38.47	142.99	58.87	72.45	84.26	94.33	109.83	120.85	140.57
c9h18rDqC	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rEqC	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rFqC	-32.77	143.90	58.86	72.68	84.53	94.66	110.50	121.18	128.35
c9h18rGqC	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rHqC	-32.77	143.90	58.80	72.37	84.35	94.65	110.44	121.51	141.27
c9h18rIqC	-30.57	143.74	58.95	72.74	84.86	95.23	111.01	121.97	141.57
c9h18rAqD	-30.57	143.74	58.95	72.74	84.86	95.23	111.01	121.97	141.57
c9h18rBqD	-32.77	143.90	58.80	72.37	84.35	94.65	110.44	121.51	141.27
c9h18rCqD	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rDqD	-38.47	142.99	58.87	72.45	84.26	94.33	109.83	120.85	140.57
c9h18rEqD	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rFqD	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rGqD	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rHqD	-32.77	143.90	58.80	72.37	84.35	94.65	110.44	121.51	141.27
c9h18rIqD	-30.57	143.74	58.95	72.74	84.86	95.23	111.01	121.97	141.57
c9h18rAqE	-30.57	143.74	58.95	72.74	84.86	95.23	111.01	121.97	141.57
c9h18rBqE	-32.77	143.90	58.80	72.37	84.35	94.65	110.44	121.51	141.27
c9h18rCqE	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rDqE	-32.77	143.90	58.89	72.58	84.54	94.76	110.40	121.40	141.07
c9h18rEqE	-38.47	141.62	58.87	72.45	84.26	94.33	109.83	120.85	140.57

c9h18qjAqA	-67.94	153.46	62.68	78.08	91.44	102.71	119.41	130.50	150.57
c9h18qjBqA	-64.27	156.58	64.89	79.74	92.76	103.85	120.50	131.75	151.90
c9h18qjCqA	-64.27	156.58	64.90	79.73	92.75	103.85	120.50	131.74	151.91
c9h18qjDqA	-64.27	156.58	64.90	79.73	92.75	103.85	120.50	131.74	151.91
c9h18qjEqA	-64.27	156.58	64.90	79.73	92.75	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjFqA	-64.27	156.58	64.90	79.73	92.75	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjGqA	-64.27	156.58	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjHqA	-64.81	156.58	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.91
c9h18qjIqA	-59.76	159.07	64.11	79.20	92.09	102.95	119.57	131.31	151.64
c9h18qjAqB	-64.27	156.58	64.89	79.74	92.76	103.85	120.50	131.75	151.90
c9h18qjBqB	-72.10	149.64	62.82	78.39	91.96	103.44	120.54	132.18	153.28
c9h18qjCqB	-69.31	155.46	65.25	80.80	93.78	104.54	120.78	132.31	152.16
c9h18qjDqB	-69.31	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjEqB	-69.31	156.84	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjFqB	-69.31	156.84	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjGqB	-69.31	156.84	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjHqB	-69.85	156.84	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.16
c9h18qjIqB	-64.81	156.58	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjAqC	-64.27	156.58	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjBqC	-69.31	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.16
c9h18qjCqC	-72.10	149.64	62.82	78.39	91.96	103.44	120.54	132.18	153.28
c9h18qjDqC	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjEqC	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjFqC	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjGqC	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjHqC	-69.31	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.16
c9h18qjIqC	-64.27	157.95	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjAqD	-64.27	156.58	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjBqD	-69.31	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.16
c9h18qjCqD	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjDqD	-72.10	149.64	62.82	78.39	91.96	103.44	120.54	132.18	153.28
c9h18qjEqD	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjFqD	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjGqD	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjHqD	-69.31	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.16
c9h18qjIqD	-64.27	157.95	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjAqE	-64.27	157.95	64.89	79.73	92.76	103.85	120.50	131.74	151.90
c9h18qjBqE	-69.31	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.16
c9h18qjCqE	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjDqE	-68.77	155.46	65.26	80.79	93.77	104.54	120.79	132.30	152.17
c9h18qjEqE	-72.10	148.26	62.81	78.40	91.97	103.44	120.54	132.18	153.28
c9h18o-AB	-52.33	122.65	51.23	64.78	76.81	87.32	103.86	114.61	117.69
c9h18o-BC	-57.37	120.15	51.67	65.72	77.81	88.11	104.12	115.35	133.11
c9h18o-CD	-56.83	120.15	51.67	65.72	77.81	88.11	104.12	115.35	133.11
c9h18o-DE	-56.83	120.15	51.67	65.72	77.81	88.11	104.12	115.35	133.11
c9h18o#3	-57.37	120.15	51.67	65.69	77.81	88.14	104.09	115.41	134.74
c9h18o-AC	-53.93	119.85	48.83	62.59	75.11	86.30	104.46	116.59	117.74
c9h18o-BD	-58.97	117.35	48.93	63.87	76.45	87.06	103.95	117.83	155.83
c9h18o-CE	-58.43	117.35	48.92	63.88	76.45	87.05	103.95	117.84	155.80
c9h18o-DF	-58.43	114.60	48.92	63.88	76.45	87.05	103.95	117.84	155.80
c9h18o#4	-58.43	117.35	48.90	63.94	76.44	86.99	104.01	117.67	139.65
c9h18o-AD	-73.23	116.35	53.44	67.34	79.55	90.12	106.46	116.68	117.71
c9h18o-BE	-78.27	113.85	53.72	68.44	80.72	90.90	106.33	117.65	146.01
c9h18o-CF	-77.73	113.85	53.72	68.44	80.72	90.90	106.33	117.65	146.01
c9h18o#5	-78.81	113.85	53.71	68.46	80.72	90.87	106.35	117.62	136.71
c9h18o#6	-83.67	108.45	53.71	68.46	80.72	90.87	106.35	117.62	136.71
c9h18o-AE	-78.63	110.95	53.44	67.34	79.55	90.12	106.46	116.68	117.71

c9h18o-BF	-83.67	108.45	53.72	68.44	80.72	90.90	106.33	117.65	146.01
c9h18o-CG	-83.13	108.45	53.72	68.44	80.72	90.90	106.33	117.65	146.01
c9h19qA	-74.87	142.74	58.22	72.76	85.33	96.10	113.02	125.12	144.78
c9h19qB	-79.91	141.63	58.98	73.36	85.99	96.92	114.02	125.39	133.64
c9h19qC	-79.37	141.63	58.98	73.36	85.99	96.92	114.02	125.39	133.64
c9h19qD	-79.37	141.63	58.98	73.36	85.99	96.92	114.02	125.39	133.64
c9h19qE	-79.37	140.25	58.98	73.36	85.99	96.92	114.02	125.39	133.64
c9h19ojA	-39.40	130.09	51.90	66.02	78.17	88.58	105.01	116.90	136.03
c9h19ojB	-42.35	128.98	52.67	66.61	78.82	89.40	106.02	117.16	124.87
c9h19ojC	-41.81	128.98	52.67	66.61	78.82	89.40	106.02	117.16	124.87
c9h19ojD	-41.81	128.97	52.67	66.60	78.82	89.40	106.02	117.16	124.87
c9h19ojE	-41.81	127.60	52.67	66.60	78.82	89.40	106.02	117.16	124.87
c9h17oAqB	-97.79	148.42	59.50	73.47	85.72	96.30	112.68	123.16	127.09
c9h17oAqC	-99.28	148.62	60.08	74.15	86.08	96.12	111.64	122.97	147.64
c9h17oAqD	-99.28	148.62	60.08	74.15	86.08	96.12	111.64	122.98	147.63
c9h17oAqE	-99.28	148.62	60.08	74.15	86.08	96.12	111.64	122.98	147.63
c9h17oBqA	-101.00	148.46	59.69	73.42	85.13	95.06	110.62	122.20	146.89
c9h17oBqC	-104.94	147.54	58.79	72.88	85.19	95.79	112.26	123.06	130.41
c9h17oBqD	-106.43	147.74	59.41	73.52	85.50	95.61	111.32	122.82	147.07
c9h17oBqE	-106.43	147.74	59.43	73.51	85.49	95.62	111.33	122.81	147.01
c9h17oBqF	-106.43	147.74	59.43	73.51	85.49	95.62	111.33	122.81	147.01
c9h17oCqA	-102.21	148.96	59.34	73.31	85.14	95.12	110.62	122.18	149.00
c9h17oCqB	-105.23	147.64	59.11	73.64	85.86	96.08	111.74	123.21	150.15
c9h17oCqD	-105.23	147.64	59.11	73.64	85.86	96.08	111.74	123.21	150.15
c9h17oCqE	-106.72	147.84	59.93	74.08	85.97	95.92	111.26	122.69	150.67
c9h17oCqF	-106.72	147.84	59.94	74.07	85.97	95.92	111.26	122.68	150.70
c9h17oCqG	-106.72	147.84	59.94	74.07	85.97	95.92	111.26	122.68	150.70
c9h17oDqA	-102.21	148.96	59.34	73.31	85.14	95.12	110.62	122.18	149.00
c9h17oDqB	-107.26	147.84	59.93	74.08	85.97	95.92	111.26	122.69	150.67
c9h17oDqC	-105.23	147.64	59.11	73.64	85.86	96.08	111.74	123.21	150.15
c9h17oDqE	-105.23	147.64	59.12	73.63	85.86	96.08	111.75	123.20	150.11
c9h17oDqF	-106.72	147.84	59.94	74.07	85.97	95.92	111.26	122.68	150.67
c9h17oDqG	-106.72	147.84	59.94	74.07	85.97	95.92	111.26	122.68	150.67
c9h17oDqH	-107.26	147.84	59.94	74.07	85.97	95.92	111.26	122.68	150.67
c9h17oEqA	-102.21	148.96	59.34	73.31	85.14	95.12	110.62	122.18	149.00
c9h17oEqB	-107.26	147.84	59.94	74.07	85.97	95.92	111.26	122.68	150.60
c9h17oEqC	-106.72	147.84	59.94	74.07	85.97	95.92	111.26	122.68	150.60
c9h17oEqD	-105.23	147.64	59.11	73.64	85.86	96.08	111.74	123.21	150.15
c8h17hco	-74.77	128.97	51.84	65.02	76.39	86.15	101.64	113.21	133.19
c8h17co	-45.12	108.66	37.92	46.02	52.56	57.81	65.42	70.60	79.37
nonanone	-81.92	128.09	51.17	64.39	75.82	85.66	101.33	113.06	133.25
c8h15hco	-2.46	108.35	36.86	45.44	52.82	59.14	69.23	76.75	90.73
c8h15co	-12.36	127.07	47.80	59.36	69.30	77.83	91.38	101.42	120.12
C9h18o4h2	-107.21	152.70	64.60	80.27	94.05	105.78	123.33	135.33	157.83
nc10h22	-59.64	130.42	55.96	70.76	84.94	97.26	114.80	127.30	145.29
Ac10h21	-11.01	133.45	55.98	70.83	83.57	94.49	111.83	124.52	144.29
Bc10h21	-13.21	133.61	55.82	70.46	83.07	93.92	111.26	124.06	143.98
Cc10h21	-13.21	133.61	55.93	70.67	83.25	94.02	111.23	123.95	143.79
Dc10h21	-13.21	133.61	55.93	70.67	83.25	94.02	111.23	123.95	143.79
Ec10h21	-13.21	133.61	55.93	70.67	83.25	94.02	111.23	123.95	143.79
c10h20-1	-29.86	129.01	53.46	67.89	80.45	91.29	108.51	120.93	140.13
c10h20-2	-32.62	128.17	53.47	67.57	79.93	90.68	107.96	120.61	139.88
c10h20-3	-32.70	127.96	52.96	67.38	79.97	90.86	108.18	120.68	139.99
c10h20-4	-32.70	127.96	52.95	67.40	79.98	90.85	108.17	120.70	140.00
c10h20-5	-32.70	126.58	52.95	67.40	79.98	90.85	108.17	120.70	140.00
Cc10h19-1	1.64	127.78	52.63	66.46	78.46	88.82	105.34	117.33	135.89
Dc10h19-2	-2.12	126.48	52.68	66.13	77.89	88.13	104.70	116.94	135.58

Ec10h19-3	-2.20	126.15	52.17	65.95	77.93	88.31	104.92	117.03	135.70
Fc10h19-4	-2.20	126.13	52.17	65.95	77.94	88.31	104.92	117.03	135.70
c10h21qjA	-44.71	147.66	61.93	77.81	91.46	103.12	121.33	134.29	155.19
c10h21qjB	-49.75	146.55	62.68	78.42	92.13	103.94	122.33	134.56	144.02
c10h21qjC	-49.21	146.55	62.68	78.42	92.13	103.94	122.33	134.55	144.02
c10h21qjD	-49.21	146.54	62.68	78.42	92.13	103.94	122.33	134.56	144.02
c10h21qjE	-49.21	146.54	62.68	78.42	92.13	103.94	122.33	134.56	144.02
c10h21qA	-79.81	152.10	63.69	79.72	93.57	105.44	124.11	137.45	159.03
c10h21qB	-84.86	150.98	64.45	80.32	94.23	106.26	125.11	137.72	147.89
c10h21qC	-84.32	150.98	64.45	80.32	94.23	106.26	125.11	137.72	147.89
c10h21qD	-84.32	150.98	64.45	80.32	94.23	106.26	125.11	137.72	147.89
c10h21qE	-84.32	150.98	64.45	80.32	94.23	106.26	125.11	137.72	147.89
c10h21ojA	-44.35	139.45	57.39	72.95	86.39	97.93	116.11	129.21	150.28
c10h21ojB	-47.30	138.34	58.14	73.56	87.06	98.75	117.11	129.49	139.11
c10h21ojC	-46.76	138.34	58.14	73.56	87.06	98.75	117.11	129.49	139.11
c10h21ojD	-46.76	138.33	58.14	73.56	87.06	98.75	117.11	129.49	139.11
c10h21ojE	-46.76	138.33	58.14	73.56	87.06	98.75	117.11	129.49	139.11
c10h20rAqA	-36.91	154.37	63.57	78.95	92.06	103.17	120.53	133.28	155.35
c10h20rBqA	-33.21	154.38	63.59	78.99	92.11	103.21	120.55	133.31	155.36
c10h20rCqA	-33.21	154.38	63.59	78.99	92.11	103.21	120.55	133.31	155.36
c10h20rDqA	-33.21	154.38	63.59	78.99	92.11	103.21	120.55	133.31	155.36
c10h20rEqA	-33.21	154.38	63.59	78.99	92.11	103.21	120.55	133.31	155.36
c10h20rFqA	-33.21	154.38	63.59	79.00	92.11	103.21	120.55	133.31	155.37
c10h20rGqA	-33.21	154.38	63.59	79.00	92.11	103.21	120.55	133.31	155.37
c10h20rHqA	-33.21	154.38	63.59	79.00	92.11	103.21	120.55	133.31	155.37
c10h20rIqA	-33.21	154.38	63.48	78.80	91.93	103.10	120.59	133.43	155.56
c10h20rJqA	-31.01	154.22	63.64	79.17	92.43	103.68	121.16	133.88	155.87
c10h20rAqB	-36.75	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12
c10h20rBqB	-43.95	152.35	64.25	79.19	92.31	103.57	120.95	133.30	155.34
c10h20rCqB	-38.25	153.26	64.37	79.52	92.77	104.11	121.49	133.73	155.63
c10h20rDqB	-38.25	153.26	64.37	79.52	92.77	104.11	121.49	133.73	155.63
c10h20rEqB	-38.25	153.26	64.37	79.52	92.77	104.11	121.49	133.73	155.63
c10h20rFqB	-38.25	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rGqB	-38.25	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rHqB	-38.25	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rIqB	-38.25	153.26	64.27	79.32	92.60	104.00	121.52	133.85	155.82
c10h20rJqB	-36.05	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12
c10h20rAqC	-35.51	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12
c10h20rBqC	-37.71	153.26	64.27	79.32	92.60	104.00	121.52	133.85	155.82
c10h20rCqC	-43.41	152.35	64.36	79.39	92.49	103.68	120.92	133.18	155.14
c10h20rDqC	-37.71	153.26	64.37	79.52	92.77	104.11	121.49	133.73	155.63
c10h20rEqC	-37.71	153.26	64.37	79.52	92.77	104.11	121.49	133.73	155.63
c10h20rFqC	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rGqC	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rHqC	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rIqC	-37.71	153.26	64.27	79.32	92.60	104.00	121.52	133.85	155.82
c10h20rJqC	-35.51	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12
c10h20rAqD	-35.51	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12
c10h20rBqD	-37.71	153.26	64.27	79.32	92.60	104.00	121.52	133.85	155.82
c10h20rCqD	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rDqD	-43.41	152.35	64.36	79.39	92.49	103.68	120.92	133.18	155.14
c10h20rEqD	-37.71	153.26	64.37	79.52	92.77	104.11	121.49	133.73	155.63
c10h20rFqD	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rGqD	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rHqD	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rIqD	-37.71	153.26	64.27	79.32	92.60	104.00	121.52	133.85	155.82
c10h20rJqD	-35.51	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12

c10h20rAqE	-35.51	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12
c10h20rBqE	-37.71	153.26	64.27	79.32	92.60	104.00	121.52	133.85	155.82
c10h20rCqE	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rDqE	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rEqE	-43.41	152.35	64.36	79.39	92.49	103.68	120.92	133.18	155.14
c10h20rFqE	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rGqE	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rHqE	-37.71	153.26	64.37	79.53	92.78	104.11	121.49	133.74	155.63
c10h20rIqE	-37.71	153.26	64.27	79.32	92.60	104.00	121.52	133.85	155.82
c10h20rJqE	-35.51	153.10	64.41	79.71	93.11	104.57	122.09	134.32	156.12
c10h20qjAq	-72.89	162.82	68.15	85.03	99.68	112.06	130.49	142.84	165.13
c10h20qjBq	-69.21	165.94	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjCq	-69.21	165.94	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjDq	-69.21	165.94	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjEq	-69.21	167.31	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjFq	-69.21	167.31	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjGq	-69.21	167.31	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjHq	-69.21	167.32	70.36	86.68	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjIq	-69.75	167.32	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.09	166.45
c10h20qjJq	-64.71	167.05	69.58	86.15	100.33	112.30	130.65	143.65	166.20
c10h20qjAq	-69.21	165.94	70.36	86.69	101.00	113.19	131.58	144.09	166.46
c10h20qjBq	-77.05	159.00	68.29	85.34	100.20	112.79	131.62	144.52	167.84
c10h20qjCq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjDq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjEq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjFq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjGq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjHq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjIq	-74.80	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjJq	-69.75	167.31	70.37	86.68	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjAq	-69.21	165.94	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjBq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjCq	-77.05	159.00	68.30	85.34	100.20	112.79	131.63	144.51	167.83
c10h20qjDq	-73.72	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjEq	-73.72	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjFq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjGq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjHq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjIq	-74.26	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjJq	-69.21	165.93	70.37	86.68	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjAq	-69.21	165.94	70.36	86.69	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjBq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjCq	-73.72	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjDq	-77.05	159.00	68.29	85.34	100.20	112.79	131.63	144.52	167.83
c10h20qjEq	-73.72	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjFq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjGq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjHq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjIq	-74.26	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjJq	-69.21	165.94	70.37	86.68	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjAq	-69.21	165.94	70.37	86.68	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h20qjBq	-74.26	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjCq	-73.72	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjDq	-73.72	164.82	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjEq	-77.05	159.00	68.29	85.34	100.20	112.79	131.63	144.52	167.83
c10h20qjFq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjGq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72

c10h20qjHq	-73.72	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjIq	-74.26	166.20	70.72	87.76	102.02	113.88	131.86	144.65	166.72
c10h20qjJq	-69.21	165.94	70.37	86.68	101.00	113.20	131.58	144.08	166.45
c10h19oAqC	-104.23	157.98	65.55	81.11	94.32	105.46	122.71	135.31	162.32
c10h19oAqB	-102.74	157.78	64.98	80.42	93.95	105.65	123.77	135.48	141.32
c10h19oAqD	-104.23	157.98	65.55	81.11	94.32	105.46	122.71	135.31	162.34
c10h19oAqE	-104.23	157.98	65.55	81.11	94.32	105.46	122.71	135.31	162.34
c10h19oBqA	-105.95	157.81	65.17	80.37	93.37	104.40	121.70	134.52	161.57
c10h19oBqC	-109.88	156.89	64.27	79.83	93.42	105.14	123.35	135.39	144.66
c10h19oBqD	-111.37	157.10	64.89	80.47	93.74	104.96	122.40	135.15	161.72
c10h19oBqE	-111.37	157.10	64.89	80.46	93.73	104.96	122.41	135.14	161.75
c10h19oBqF	-111.37	157.10	64.89	80.46	93.73	104.96	122.41	135.14	161.75
c10h19oCqA	-107.16	158.31	64.80	80.28	93.39	104.46	121.69	134.53	163.69
c10h19oCqB	-110.17	157.00	64.57	80.61	94.11	105.42	122.81	135.56	164.85
c10h19oCqD	-110.17	157.00	64.58	80.61	94.11	105.42	122.81	135.56	164.82
c10h19oCqE	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oCqF	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oCqG	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oDqA	-107.16	158.31	64.80	80.28	93.39	104.46	121.69	134.53	163.69
c10h19oDqB	-112.20	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oDqC	-110.17	157.00	64.57	80.61	94.11	105.42	122.81	135.56	164.80
c10h19oDqE	-110.17	157.00	64.57	80.61	94.12	105.42	122.81	135.56	164.85
c10h19oDqF	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oDqG	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oDqH	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oEqA	-107.16	158.31	64.80	80.28	93.39	104.46	121.69	134.53	163.69
c10h19oEqB	-112.20	157.20	65.41	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.31
c10h19oEqC	-111.66	157.20	65.41	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.31
c10h19oEqD	-110.17	157.00	64.57	80.61	94.11	105.42	122.81	135.56	164.80
c10h19oEqF	-110.17	157.00	64.57	80.61	94.12	105.42	122.81	135.56	164.85
c10h19oEqG	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oEqH	-111.66	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h19oEqI	-112.20	157.20	65.40	81.03	94.21	105.27	122.34	135.02	165.33
c10h20o-AB	-57.27	132.00	56.70	71.73	85.05	96.67	114.95	126.93	131.93
c10h20o-BC	-62.32	129.51	57.13	72.67	86.05	97.46	115.19	127.68	147.81
c10h20o-CD	-61.78	129.51	57.13	72.67	86.05	97.46	115.19	127.68	147.81
c10h20o-DE	-61.78	129.51	57.13	72.67	86.05	97.46	115.19	127.68	147.81
c10h20o-EF	-61.78	126.75	57.13	72.67	86.05	97.46	115.19	127.68	147.81
c10h20o-AC	-58.87	129.20	54.30	69.54	83.34	95.65	115.54	128.91	131.98
c10h20o-BD	-63.92	126.71	54.39	70.83	84.69	96.40	115.02	130.17	171.01
c10h20o-CE	-63.38	126.71	54.39	70.83	84.69	96.40	115.02	130.17	171.01
c10h20o-DF	-63.38	126.71	54.39	70.83	84.69	96.40	115.02	130.17	171.01
c10h20o-AD	-78.17	125.70	58.92	74.29	87.79	99.46	117.55	129.01	131.96
c10h20o-BE	-83.22	123.21	59.17	75.40	88.97	100.24	117.40	130.00	160.79
c10h20o-CF	-82.68	123.21	59.17	75.40	88.97	100.24	117.40	130.00	160.79
c10h20o-DG	-82.68	120.45	59.17	75.40	88.97	100.24	117.40	130.00	160.79
c10h20o-AE	-83.57	120.30	58.93	74.28	87.78	99.47	117.55	129.00	131.95
c10h20o-BF	-88.62	117.81	59.17	75.40	88.97	100.24	117.40	130.00	160.79
c10h20o-CG	-88.08	117.81	59.17	75.40	88.97	100.24	117.40	130.00	160.79
Ac10h19oB	-40.66	136.58	56.38	70.85	83.22	93.76	110.41	122.77	146.40
Bc10h19oA	-37.42	136.36	57.22	71.48	83.59	93.88	110.17	122.39	146.50
Bc10h19oC	-46.95	135.54	56.97	71.22	83.32	93.58	109.82	122.23	149.86
Cc10h19oB	-46.66	134.98	56.58	70.87	83.03	93.39	109.86	122.25	145.91
Cc10h19oD	-46.95	135.16	57.10	71.42	83.50	93.70	109.80	122.11	149.59
Dc10h19oC	-46.95	135.08	57.10	71.43	83.51	93.70	109.79	122.12	149.68
Dc10h19oE	-46.95	135.12	57.10	71.43	83.50	93.70	109.79	122.11	149.59
Ec10h19oD	-46.95	135.10	57.11	71.42	83.50	93.70	109.80	122.11	149.60
Fc10h19oE	-46.95	135.12	57.11	71.42	83.50	93.70	109.80	122.11	149.60
Ac10h19oC	-38.35	139.66	57.09	71.38	83.39	93.51	109.43	121.60	148.98
Cc10h19oA	-33.12	140.60	57.19	71.29	83.17	93.23	109.20	121.31	145.25
Bc10h19oD	-40.55	139.82	56.95	71.00	82.88	92.94	108.86	121.13	148.60
Dc10h19oB	-40.26	139.72	56.53	70.65	82.59	92.73	108.89	121.15	144.70
Cc10h19oE	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
Ec10h19oC	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.02	148.47
Dc10h19oF	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
Fc10h19oD	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
Ac10h19oD	-38.35	139.66	57.09	71.38	83.39	93.51	109.43	121.60	148.89
Dc10h19oA	-33.12	140.60	57.19	71.29	83.17	93.23	109.20	121.31	145.25
Bc10h19oE	-40.55	139.82	56.95	71.00	82.88	92.94	108.86	121.13	148.60
Ec10h19oB	-40.26	139.72	56.53	70.65	82.59	92.73	108.89	121.15	144.70
Cc10h19oF	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
Fc10h19oC	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.02	148.47
Gc10h19oD	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
Ac10h19oE	-38.35	139.66	57.09	71.38	83.39	93.51	109.43	121.60	148.89
Ec10h19oA	-33.12	140.60	57.19	71.29	83.17	93.23	109.20	121.31	145.25
c3h7coc6h1	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
dec4*o7oo	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
dec4*o5j7o	-71.46	154.96	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
dec4*o5oo7	-99.57	170.83	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
dec4*o7*o5	-137.52	163.21	65.72	81.12	93.89	104.44	120.49	132.57	165.78
c4h9coc5h1	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
dec5*o8oo	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
dec5*o6j8o	-71.46	154.96	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
dec5*o6oo8	-99.57	170.83	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
dec5*o8*o6	-137.52	163.21	65.72	81.12	93.89	104.44	120.49	132.57	165.78
c2h5coc7h1	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
dec3*o6oo	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
dec3*o4j6o	-71.46	154.96	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
dec3*o4oo6	-99.57	170.83	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
dec3*o6*o4	-137.52	163.21	65.72	81.12	93.89	104.44	120.49	132.57	165.78
ch3coc8h16	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
dec2*o5oo	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
dec2*o3j5o	-71.46	154.96	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
dec2*o3oo5	-99.57	170.83	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
dec2*o5*o3	-137.52	163.21	65.72	81.12	93.89	104.44	120.49	132.57	165.78
c5h11coc4h	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40
dec5*o2oo	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
dec5*o4j2o	-71.46	154.96	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
dec5*o4oo2	-99.57	170.83	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
dec2*o5*o4	-137.52	163.21	65.72	81.12	93.89	104.44	120.49	132.57	165.78
c8ald3oxo	-99.26	127.57	44.94	56.63	66.56	74.95	88.12	98.16	122.02
c7ald3oxo	-94.32	118.21	39.47	49.68	58.31	65.60	77.04	85.82	107.31
c6ald3oxo	-89.37	108.85	34.01	42.72	50.07	56.26	65.97	73.48	92.57
c5ald3oxo	-84.42	99.50	28.54	35.76	41.82	46.92	54.90	61.15	77.77
c4ald3oxo	-79.19	90.04	22.57	28.23	33.10	37.27	43.89	48.94	59.76
mecomeco	-79.19	90.04	22.57	28.23	33.10	37.27	43.89	48.94	59.76
etcomeco	-84.42	99.50	28.54	35.76	41.82	46.92	54.90	61.15	77.77
prcomeco	-89.37	108.85	34.01	42.72	50.07	56.26	65.97	73.48	92.57
bucomeco	-94.32	118.21	39.47	49.68	58.31	65.60	77.04	85.82	107.31
c5h11cooch2	-63.96	129.05	43.97	54.95	64.22	72.05	84.38	93.89	117.21
Fc10h19oB	-40.26	139.72	56.53	70.65	82.59	92.73	108.89	121.15	144.70
Bc10h19oF	-40.55	139.82	56.95	71.00	82.88	92.94	108.86	121.13	148.60
Gc10h19oC	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.02	148.47
Hc10h19oD	-40.55	139.82	57.04	71.21	83.07	93.04	108.82	121.03	148.40

c10h19oBqj	-70.84	153.38	63.39	78.48	91.27	102.07	118.92	131.37	157.82
c10h19oAqj	-51.43	153.34	63.20	78.53	91.86	103.31	120.98	132.33	137.48
c10h19oCqj	-75.07	152.56	62.81	78.70	92.01	103.10	120.03	132.39	161.16
c10h19oBqj	-74.78	152.46	62.50	77.93	91.32	102.81	120.57	132.22	140.79
c10h19oDqj	-75.07	152.56	62.81	78.70	92.01	103.10	120.03	132.39	161.10
c10h19oCqj	-75.07	152.56	62.81	78.70	92.01	103.10	120.03	132.39	161.11
c10h19oEqj	-75.07	152.56	62.81	78.70	92.01	103.10	120.03	132.39	161.10
c10h19oDqj	-75.07	152.56	62.80	78.71	92.02	103.09	120.03	132.40	161.14
c10h19oEqj	-75.07	152.56	62.80	78.71	92.02	103.09	120.03	132.40	161.14
c10h19oCqj	-72.05	153.88	63.03	78.37	91.29	102.13	118.91	131.37	159.96
c10h19oAqj	-69.12	153.54	63.77	79.22	92.23	103.13	119.92	132.16	158.58
c10h19oDqj	-77.10	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.87	161.64
c10h19oBqj	-76.27	152.66	63.11	78.58	91.65	102.63	119.62	132.00	157.96
c10h19oEqj	-76.56	152.76	63.63	79.13	92.11	102.94	119.56	131.86	161.63
c10h19oCqj	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
c10h19oFqj	-76.56	152.76	63.64	79.12	92.11	102.94	119.56	131.85	161.63
c10h19oDqj	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
c10h19oDqj	-72.05	153.88	63.03	78.37	91.29	102.13	118.91	131.37	159.96
c10h19oAqj	-69.12	153.54	63.77	79.23	92.23	103.13	119.92	132.16	158.58
c10h19oEqj	-77.10	152.76	63.63	79.13	92.12	102.94	119.55	131.86	161.63
c10h19oBqj	-76.27	152.66	63.12	78.57	91.64	102.63	119.62	131.99	158.00
c10h19oFqj	-76.56	152.76	63.63	79.13	92.11	102.94	119.56	131.86	161.63
c10h19oCqj	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
c10h19oDqj	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
c10h19oEqj	-72.05	153.88	63.03	78.37	91.29	102.13	118.91	131.36	159.96
c10h19oAqj	-69.12	153.54	63.77	79.23	92.23	103.13	119.92	132.16	158.58
c10h19oBqj	-76.27	152.66	63.12	78.57	91.64	102.63	119.62	131.99	158.00
c10h19oFqj	-77.10	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.87	161.64
c10h19oCqj	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
c10h19oDqj	-76.56	152.76	63.63	79.14	92.12	102.94	119.55	131.86	161.64
Dc10h18oAq	10.90	160.06	64.85	79.74	92.50	103.38	120.25	131.27	136.05
Ec10h18oAq	-56.13	160.06	64.85	79.74	92.50	103.38	120.25	131.27	136.05
Ec10h18oAq	-57.62	160.26	65.43	80.42	92.86	103.20	119.19	131.09	157.18
Fc10h18oAq	-57.62	160.26	65.43	80.42	92.86	103.20	119.19	131.09	157.18
Bc10h18oAq	-64.03	156.06	65.45	80.63	93.29	103.84	120.15	132.19	158.39
Bc10h18oAq	-64.03	156.05	65.46	80.62	93.28	103.84	120.15	132.18	158.39
Cc10h18oBq	-65.74	155.42	65.11	79.90	92.34	102.80	119.16	131.40	157.62
Ac10h18oBq	-63.68	156.03	64.00	79.35	92.59	103.90	121.34	132.80	141.09
Ac10h18oBq	-65.17	156.23	64.62	79.99	92.90	103.72	120.40	132.56	158.25
Ac10h18oBq	-65.17	156.23	64.61	80.00	92.91	103.72	120.39	132.57	158.27
Cc10h18oBq	-71.17	154.75	64.83	79.99	92.71	103.36	119.86	132.01	157.80
Cc10h18oBq	-71.17	154.72	64.83	80.00	92.71	103.36	119.85	132.02	157.80
Dc10h18oCq	-66.95	155.97	64.75	79.79	92.36	102.86	119.15	131.39	159.78
Dc10h18oCq	-69.97	154.65	64.52	80.13	93.09	103.82	120.26	132.42	160.97
Ec10h18oCq	-63.57	159.27	64.46	79.92	92.65	103.16	119.29	131.34	159.78
Ac10h18oCq	-61.37	159.12	64.51	80.08	92.97	103.63	119.90	131.90	160.24
Bc10h18oCq	-69.97	155.02	64.41	79.91	92.89	103.71	120.30	132.53	161.12
Fc10h18oCq	-63.57	159.27	64.45	79.92	92.65	103.16	119.29	131.34	159.74
Gc10h18oCq	-63.57	159.27	64.45	79.92	92.65	103.16	119.29	131.34	159.74
Bc10h18oCq	-71.46	155.22	65.23	80.34	93.00	103.55	119.82	132.00	161.65
Dc10h18oCq	-71.46	154.84	65.35	80.56	93.19	103.66	119.79	131.89	161.45
Dc10h18oCq	-71.46	154.81	65.35	80.55	93.18	103.67	119.79	131.88	161.45
Cc10h18oDq	-66.95	156.01	64.75	79.80	92.36	102.86	119.14	131.39	159.77
Ec10h18oDq	-66.95	155.96	64.75	79.79	92.36	102.86	119.15	131.39	159.78
Ec10h18oDq	-72.00	154.84	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
Ac10h18oDq	9.95	159.12	64.51	80.08	92.97	103.63	119.90	131.91	160.20
Ec10h18oDq	-69.97	154.64	64.52	80.13	93.09	103.82	120.27	132.42	160.90

Fc10h18oDq	-63.57	159.27	64.46	79.91	92.65	103.16	119.29	131.34	159.72
Bc10h18oDq	-63.57	159.27	64.37	79.70	92.46	103.06	119.34	131.44	159.94
Cc10h18oDq	-69.97	154.66	64.51	80.14	93.09	103.82	120.26	132.43	160.94
Gc10h18oDq	9.93	159.27	64.46	79.91	92.64	103.16	119.30	131.33	159.76
Hc10h18oDq	-63.57	159.27	64.46	79.91	92.64	103.16	119.30	131.33	159.76
Cc10h18oDq	-71.46	154.86	65.33	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
Ec10h18oDq	-71.46	154.90	65.35	80.56	93.19	103.66	119.79	131.89	161.45
Ec10h18oDq	-71.46	154.87	65.35	80.56	93.19	103.66	119.79	131.89	161.45
Dc10h18oEq	-66.95	156.00	64.75	79.80	92.36	102.86	119.14	131.40	159.78
Dc10h18oEq	-72.00	155.01	65.35	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.44
Fc10h18oEq	-72.00	154.85	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
Fc10h18oEq	-71.46	154.85	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.45
Ac10h18oEq	-61.37	159.12	64.51	80.08	92.97	103.63	119.90	131.91	160.20
Bc10h18oEq	-63.57	159.27	64.46	79.91	92.65	103.16	119.29	131.34	159.72
Fc10h18oEq	-69.97	154.65	64.52	80.13	93.08	103.82	120.27	132.42	160.91
Gc10h18oEq	-63.57	159.27	64.46	79.91	92.65	103.16	119.29	131.34	159.72
Cc10h18oEq	-63.57	159.27	64.46	79.91	92.64	103.16	119.30	131.33	159.76
Dc10h18oEq	-69.97	154.64	64.52	80.13	93.08	103.82	120.26	132.43	160.95
Hc10h18oEq	-63.57	159.27	64.46	79.91	92.64	103.16	119.30	131.33	159.76
Ic10h18oEq	-63.57	159.27	64.37	79.70	92.46	103.06	119.34	131.44	159.94
Ec10h18oFq	-72.00	154.94	65.35	80.56	93.19	103.66	119.79	131.89	161.45
Ec10h18oFq	-71.46	154.96	65.34	80.57	93.19	103.66	119.78	131.90	161.44
Gc10h18oFq	-71.46	154.84	65.35	80.55	93.18	103.66	119.79	131.88	161.45
Dc10h18oFq	-69.97	154.64	64.52	80.13	93.08	103.82	120.26	132.43	160.95
c10h18oAqB	-92.14	172.99	71.18	87.93	101.81	113.25	130.39	142.47	169.89
c10h18oAqB	-92.14	172.99	71.18	87.93	101.81	113.25	130.39	142.47	169.89
c10h18oAqC	-93.63	173.19	72.02	88.35	101.91	113.10	129.92	141.93	170.44
c10h18oAqC	-93.63	171.81	72.02	88.35	101.91	113.10	129.92	141.93	170.44
c10h18oAqD	-75.94	171.62	71.18	87.93	101.81	113.25	130.39	142.48	169.89
c10h18oAqE	-75.94	171.62	71.18	87.93	101.81	113.25	130.39	142.48	169.89
c10h18oBqA	-93.86	172.83	70.82	87.17	100.85	112.20	129.40	141.67	169.08
c10h18oBqC	-93.86	171.45	70.82	87.18	100.85	112.20	129.39	141.68	169.08
c10h18oBqD	-95.35	171.65	71.63	87.62	100.96	112.04	128.91	141.15	169.69
c10h18oBqE	-95.35	171.65	71.65	87.60	100.94	112.04	128.92	141.14	169.63
c10h18oBqE	-99.29	170.73	70.53	87.28	101.22	112.75	130.09	142.30	169.36
c10h18oBqF	-99.29	172.11	70.53	87.28	101.22	112.75	130.09	142.30	169.36
c10h18oCqA	-95.07	173.33	70.45	87.07	100.87	112.25	129.38	141.67	171.23
c10h18oCqB	-98.09	172.01	70.50	87.12	101.31	113.25	131.13	142.32	150.55
c10h18oCqB	-99.57	172.21	71.04	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	173.01
c10h18oCqD	-95.07	171.95	70.45	87.07	100.87	112.25	129.38	141.67	171.23
c10h18oCqD	-98.09	170.63	70.49	87.13	101.31	113.24	131.13	142.33	150.55
c10h18oCqD	-99.57	170.83	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oCqD	-99.57	170.83	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oCqE	-99.57	170.84	71.04	87.85	101.70	113.06	130.02	142.18	173.01
c10h18oCqF	-99.57	172.21	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oCqG	-99.57	172.21	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oDqA	-95.07	173.33	70.45	87.07	100.87	112.25	129.38	141.67	171.23
c10h18oDqA	-95.07	171.95	70.45	87.07	100.87	112.25	129.38	141.67	171.23
c10h18oDqB	-100.11	172.21	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.17	172.94
c10h18oDqC	-95.07	171.95	70.45	87.07	100.87	112.25	129.38	141.67	171.23
c10h18oDqC	-98.09	172.01	70.50	87.12	101.31	113.24	131.13	142.32	150.55
c10h18oDqC	-99.57	170.83	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oDqE	-100.11	170.84	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.17	172.94
c10h18oDqE	-98.09	170.63	70.50	87.12	101.31	113.24	131.13	142.32	150.55
c10h18oDqE	-99.57	170.83	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oDqE	-99.57	170.83	71.04	87.85	101.71	113.05	130.02	142.19	172.95
c10h18oDqF	-99.57	172.21	71.04	87.85	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93

c10h18oDqG	-99.57	172.21	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oDqH	-99.57	172.21	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oEqA	-95.07	173.33	70.45	87.07	100.87	112.25	129.38	141.67	171.23
c10h18oEqB	-100.11	172.21	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oEqB	-100.11	172.21	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oEqC	-99.57	170.83	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oEqD	-95.07	171.95	70.45	87.07	100.87	112.25	129.38	141.67	171.23
c10h18oEqD	-100.11	170.84	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oEqD	-98.09	170.63	70.50	87.12	101.31	113.24	131.13	142.32	150.55
c10h18oEqD	-99.57	170.83	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oEqF	-99.57	172.21	71.04	87.85	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oEqF	-98.09	172.01	70.50	87.12	101.31	113.24	131.13	142.32	150.55
c10h18oEqF	-99.57	172.21	71.04	87.85	101.71	113.05	130.02	142.19	172.95
c10h18oEqF	-100.11	172.21	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oFqB	-100.11	170.83	71.04	87.85	101.70	113.05	130.02	142.18	172.95
c10h18oFqC	-99.57	172.21	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oFqD	-99.57	170.83	71.05	87.84	101.70	113.06	130.02	142.18	172.93
c10h18oFqE	-98.09	172.01	70.50	87.12	101.31	113.24	131.13	142.32	150.55
c10h17oAoB	-122.52	160.22	65.78	81.56	94.88	106.09	123.41	135.71	153.70
c10h17oAoB	-123.99	160.50	66.87	82.07	94.97	105.89	122.93	135.18	153.34
c10h17oAoB	-123.99	160.50	66.87	82.07	94.97	105.89	122.93	135.18	153.34
c10h17oAoC	-127.49	162.91	64.63	80.55	94.00	105.32	122.85	135.30	153.48
c10h17oAoC	-128.96	163.19	65.74	81.03	94.01	105.00	122.17	134.53	152.96
c10h17oAoC	-128.96	163.19	65.74	81.03	94.01	105.00	122.17	134.53	152.96
c10h17oAoD	-129.16	162.49	66.93	81.93	94.66	105.45	122.34	134.58	153.00
c10h17oAoD	-129.16	162.49	66.93	81.93	94.66	105.45	122.34	134.58	153.00
c10h17oAoD	-129.16	162.49	66.93	81.93	94.66	105.45	122.34	134.58	153.00
c10h17oAoE	-129.16	162.49	66.93	81.93	94.66	105.45	122.34	134.58	153.00
c10h17oAoE	-129.16	162.49	66.93	81.93	94.66	105.45	122.34	134.58	153.00
c10h17oBoC	-127.09	162.30	66.20	80.59	93.06	103.83	121.08	133.81	152.71
c10h17oBoC	-131.47	162.41	64.38	80.11	93.50	104.84	122.53	135.17	153.52
c10h17oBoC	-132.70	163.97	65.84	81.16	94.00	104.70	120.99	132.77	160.06
c10h17oBoD	-130.56	163.90	65.66	80.37	93.02	103.87	121.11	133.76	152.64
c10h17oBoD	-134.94	164.01	63.86	79.88	93.42	104.83	122.51	135.08	153.44
c10h17oBoE	-132.23	163.48	67.57	81.66	93.79	104.22	120.87	133.19	151.86
c10h17oBoE	-136.61	163.59	66.21	81.27	94.08	104.95	122.02	134.40	152.99
c10h17oBoE	-136.61	163.59	66.21	81.27	94.08	104.95	122.02	134.40	152.99
c10h17oBoE	-136.61	163.59	66.21	81.27	94.08	104.95	122.02	134.40	152.99
c10h17oBoF	-136.61	163.59	66.21	81.27	94.08	104.95	122.02	134.40	152.99
c10h17oBoF	-136.61	163.59	66.21	81.27	94.08	104.95	122.02	134.40	152.99
c10h17oCoD	-128.48	165.19	65.76	80.95	93.65	104.21	120.28	132.13	162.01
c10h17oCoD	-131.86	162.59	65.10	80.64	93.82	104.97	122.35	134.84	153.30
c10h17oCoD	-131.86	162.59	65.10	80.64	93.82	104.97	122.35	134.84	153.30
c10h17oCoD	-132.99	164.07	66.35	81.72	94.48	105.01	120.92	132.64	163.61
c10h17oCoD	-132.99	164.07	66.35	81.72	94.48	105.01	120.92	132.64	163.61
c10h17oCoE	-135.33	164.19	64.65	80.44	93.76	104.97	122.34	134.76	153.22
c10h17oCoE	-135.33	164.19	64.65	80.44	93.76	104.97	122.34	134.76	153.22
c10h17oCoF	-137.00	163.77	66.83	81.81	94.50	105.24	122.04	134.26	152.87
c10h17oCoF	-137.00	163.77	66.83	81.81	94.50	105.24	122.04	134.26	152.87
c10h17oCoG	-137.00	163.77	66.83	81.81	94.50	105.24	122.04	134.26	152.87
c10h17oCoG	-137.00	163.77	66.83	81.81	94.50	105.24	122.04	134.26	152.87
c10h17oDoE	-128.48	165.19	65.76	80.95	93.65	104.21	120.28	132.13	162.01
c10h17oDoE	-133.53	164.07	66.36	81.71	94.47	105.01	120.93	132.63	163.61
c10h17oDoE	-131.86	162.59	65.10	80.64	93.82	104.97	122.35	134.84	153.30
c10h17oDoE	-131.86	162.59	65.10	80.64	93.82	104.97	122.35	134.84	153.30
c10h17oDoE	-132.99	164.07	66.35	81.72	94.48	105.01	120.92	132.64	163.61
c10h17oDoE	-132.99	164.07	66.35	81.72	94.48	105.01	120.92	132.64	163.61

c10h17oDoF	-135.33	164.19	64.65	80.44	93.76	104.97	122.34	134.76	153.22
c10h17oDoF	-135.33	164.19	64.65	80.44	93.76	104.97	122.34	134.76	153.22
c10h17oDoG	-137.00	163.77	66.83	81.81	94.50	105.24	122.04	134.26	152.87
c10h17oEoF	-132.99	164.07	66.35	81.72	94.48	105.01	120.92	132.64	163.61
c10h17oEoF	-131.86	162.59	65.10	80.64	93.82	104.97	122.35	134.84	153.30
c10h17oEoF	-132.99	164.07	66.35	81.72	94.48	105.01	120.92	132.64	163.61
c10h17oEoF	-133.53	164.07	66.35	81.72	94.48	105.01	120.92	132.64	163.61
c10h19o2h	-54.37	148.66	61.91	76.74	89.97	101.38	118.77	130.72	152.51
c10h21o2h	-84.32	150.98	64.49	80.21	94.24	106.38	125.00	137.96	161.59
c9h19hco	-79.72	138.33	57.31	71.97	84.63	95.50	112.72	125.54	147.74
c9h19co	-45.12	108.66	37.92	46.02	52.56	57.81	65.42	70.60	79.37
c10h20oB	-86.87	137.45	56.65	71.34	84.06	95.00	112.41	125.37	149.87
c10h20oC	-87.16	137.55	57.16	71.90	84.53	95.30	112.34	125.24	153.57
c10h20oD	-87.16	137.55	57.16	71.90	84.53	95.30	112.34	125.24	153.49
c10h20oE	-87.16	137.55	57.16	71.90	84.53	95.30	112.34	125.24	153.49
c10h20rohA	-53.56	143.66	59.73	74.72	87.63	98.74	116.31	128.40	137.66
c10h20qjoh	-89.56	156.60	66.13	82.84	96.88	108.62	126.60	139.53	166.85
c10h20rohB	-54.10	143.66	59.73	74.72	87.63	98.74	116.31	128.40	137.66
c10h20qjoh	-90.10	156.60	66.14	82.83	96.88	108.62	126.60	139.52	166.88
c10h20rohC	-53.56	143.66	59.73	74.72	87.63	98.74	116.31	128.40	137.66
c10h20qjoh	-89.56	156.60	66.13	82.84	96.88	108.62	126.60	139.53	166.85
c10h20rohD	-53.56	143.66	59.73	74.72	87.63	98.74	116.31	128.40	137.66
c10h20qjoh	-89.56	156.60	66.13	82.84	96.88	108.62	126.60	139.53	166.85
c10h20rohE	-53.56	143.66	59.73	74.72	87.63	98.74	116.31	128.40	137.66
c10h20qjoh	-89.56	156.60	66.13	82.84	96.88	108.62	126.60	139.53	166.85
c2h5cohco	-69.66	74.80	24.84	30.21	34.81	38.72	44.75	48.87	54.74
c2h5coco	-34.36	71.53	23.09	28.10	32.42	36.11	41.75	45.54	50.80
ch3coch2hc	-79.19	90.04	22.57	28.23	33.10	37.27	43.89	48.94	59.76
ch3coch2co	-43.88	91.49	21.59	26.56	30.78	34.37	40.15	44.67	54.89
choch2ch2c	-69.95	87.80	25.80	30.83	35.06	38.63	44.35	48.78	56.27
choch2ch2c	-31.70	90.13	25.56	29.55	33.08	36.18	41.29	45.17	51.07
c3h7cohco	-74.61	84.16	30.31	37.16	43.05	48.07	55.82	61.21	69.43
c3h7coco	-39.31	80.93	28.55	35.06	40.67	45.45	52.82	57.88	65.50
c2h5coch2h	-84.42	99.50	28.54	35.76	41.82	46.92	54.90	61.15	77.77
c2h5coch2c	-49.12	100.96	27.57	34.08	39.50	44.02	51.15	56.88	73.17
ch3coc2h4h	-82.04	97.66	30.61	37.14	42.72	47.49	55.10	60.99	74.61
ch3coc2h4c	-46.74	99.12	29.64	35.46	40.39	44.60	51.36	56.72	69.72
hcoc3h6hco	-74.90	97.16	31.27	37.77	43.30	47.99	55.41	61.15	75.16
hcoc3h6co	-39.59	100.00	30.29	36.10	40.98	45.09	51.67	56.89	70.30
c4h9cohco	-79.56	93.51	35.78	44.12	51.30	57.41	66.90	73.55	84.09
c4h9coco	-44.26	90.34	34.02	42.02	48.91	54.79	63.90	70.21	80.16
c3h7coch2h	-89.37	108.85	34.01	42.72	50.07	56.26	65.97	73.48	92.57
c3h7coch2c	-54.06	110.32	33.03	41.05	47.74	53.36	62.23	69.22	87.86
c2h5coc2h4	-87.28	107.11	36.59	44.65	51.44	57.14	66.11	73.20	92.66
c2h5coc2h4	-51.97	108.58	35.61	42.98	49.11	54.25	62.37	68.93	87.97
ch3coc3h6h	-86.99	107.01	36.08	44.09	50.96	56.84	66.18	73.33	89.32
ch3coc3h6c	-51.68	108.48	35.11	42.41	48.64	53.94	62.44	69.06	84.40
c5h11cohco	-84.50	102.87	41.24	51.08	59.54	66.75	77.97	85.88	98.81
c5h11coco	-49.20	99.71	39.49	48.98	57.16	64.14	74.97	82.55	94.89
c4h9coch2h	-94.32	118.21	39.47	49.68	58.31	65.60	77.04	85.82	107.31
c4h9coch2c	-59.01	119.69	38.51	48.00	55.98	62.71	73.30	81.55	102.56
c3h7coc2h4	-92.22	116.47	42.06	51.61	59.68	66.49	77.18	85.53	107.44
c3h7coc2h4	-56.92	117.95	41.08	49.94	57.36	63.59	73.44	81.27	102.70
c7oAoE	-92.22	116.47	42.06	51.61	59.68	66.49	77.18	85.53	107.44
c7oyAoE	-56.92	117.95	41.08	49.94	57.36	63.59	73.44	81.27	102.70
c6h13cocho	-89.45	112.23	46.70	58.04	67.79	76.10	89.04	98.22	113.48
c6h13coco	-54.15	109.10	44.96	55.93	65.40	73.49	86.05	94.88	109.56

c8oAoC	-99.26	127.57	44.95	56.63	66.55	74.95	88.12	98.16	122.04
c8oyAoC	-63.96	129.05	43.97	54.96	64.23	72.05	84.38	93.89	117.24
c8oAoD	-97.17	125.83	47.52	58.57	67.93	75.83	88.25	97.87	122.18
c8oyAoD	-61.86	127.31	46.55	56.90	65.60	72.93	84.51	93.61	117.39
c8oAoE	-97.17	125.83	47.52	58.57	67.93	75.83	88.25	97.87	122.18
c8oyAoE	-61.86	127.31	46.55	56.90	65.60	72.93	84.51	93.61	117.39
c7h15cocho	-94.40	121.58	52.17	65.00	76.03	85.44	100.12	110.56	128.14
c7h15coco	-59.09	118.46	50.42	62.90	73.65	82.83	97.12	107.23	124.23
c9oAoC	-104.21	136.93	50.41	63.59	74.80	84.29	99.19	110.49	136.77
c9oyAoC	-68.90	138.41	49.43	61.92	72.48	81.39	95.45	106.23	131.95
c9oAoD	-102.12	135.19	52.99	65.53	76.17	85.17	99.33	110.21	136.91
c9oyAoD	-66.81	136.67	52.01	63.85	73.85	82.28	95.59	105.94	132.10
c9oAoE	-102.12	135.19	52.99	65.53	76.17	85.17	99.33	110.21	136.91
c9oyAoE	-66.81	136.67	52.01	63.85	73.85	82.28	95.59	105.94	132.10
c2h5coc3h6	-18.56	102.21	35.22	43.55	50.42	56.13	65.13	72.25	90.22
c2h5coc3h6	-52.26	116.43	41.17	50.53	58.31	64.76	74.62	82.01	101.24
c2h5coc3h6	-87.37	120.89	42.94	52.43	60.41	67.09	77.40	85.17	104.92
c2h5coc3h6	-51.91	108.22	36.63	45.67	53.24	59.57	69.41	76.95	96.02
Fc6oC	-18.56	102.21	35.22	43.55	50.42	56.13	65.13	72.25	90.22
c6oCqjF	-52.26	116.43	41.17	50.53	58.31	64.76	74.62	82.01	101.24
Dc6oCqF	-47.17	118.41	42.88	51.96	59.38	65.48	74.85	82.04	101.06
c6oCqFqjD	-75.28	135.89	48.58	59.24	67.89	74.88	85.09	92.32	112.58
nc3h7coc2h	-18.13	103.51	34.98	42.79	49.58	55.48	65.01	72.14	83.03
nc3h7coc2h	-52.26	116.44	41.16	50.54	58.32	64.76	74.61	82.02	101.31
nc3h7coc2h	-87.37	120.89	42.94	52.43	60.41	67.09	77.40	85.17	104.98
nc3h7coc2h	-51.91	108.23	36.63	45.67	53.24	59.57	69.41	76.94	96.04
c3h7coc2h4	-52.26	116.44	41.16	50.54	58.32	64.76	74.61	82.02	101.31
c2h5chcoc2	-47.17	118.46	42.87	51.96	59.38	65.48	74.84	82.04	101.13
c3h7cochch	-47.17	118.47	42.88	51.96	59.38	65.48	74.84	82.04	101.13
c2h5chqjco	-75.28	135.89	48.58	59.24	67.89	74.88	85.08	92.33	112.58
c3h7cochqj	-75.28	134.51	48.58	59.24	67.89	74.88	85.09	92.32	112.58
nc4h9coc2h	-23.51	111.58	40.69	50.51	58.66	65.47	76.20	84.59	104.88
nc4h9coc2h	-57.21	125.80	46.64	57.49	66.55	74.10	85.69	94.35	115.95
nc4h9coc2h	-92.32	130.24	48.40	59.39	68.66	76.43	88.47	97.51	119.64
nc4h9coc2h	-56.85	117.59	42.09	52.64	61.49	68.91	80.48	89.29	110.67
Ac7oC	-23.51	111.58	40.69	50.51	58.66	65.47	76.20	84.59	104.88
c7oCqjA	-57.21	125.80	46.64	57.49	66.55	74.10	85.69	94.35	115.95
Dc7oCqA	-52.11	127.81	48.34	58.92	67.63	74.82	85.92	94.38	115.76
c7oCqAqjD	-80.23	143.87	54.05	66.19	76.13	84.22	96.16	104.66	127.28
nc3h7coc3h	-23.51	111.58	40.69	50.51	58.66	65.47	76.20	84.59	104.88
nc3h7coc3h	-57.21	125.80	46.64	57.49	66.55	74.10	85.69	94.35	115.95
nc3h7coc3h	-92.32	130.24	48.40	59.39	68.66	76.43	88.47	97.51	119.64
nc3h7coc3h	-56.85	117.59	42.09	52.64	61.49	68.91	80.48	89.29	110.67
Ac7oD	-23.51	111.58	40.69	50.51	58.66	65.47	76.20	84.59	104.88
c7oDqjA	-57.21	125.80	46.64	57.49	66.55	74.10	85.69	94.35	115.95
Cc7oDqA	-52.11	127.82	48.35	58.91	67.62	74.83	85.93	94.37	115.76
c7oDqAqjC	-80.23	143.87	54.05	66.20	76.14	84.22	96.16	104.67	127.25
nc6h13coc3	-38.35	139.66	57.09	71.38	83.39	93.51	109.43	121.60	148.89
nc6h13coc3	-72.05	153.88	63.03	78.37	91.29	102.13	118.91	131.36	159.93
nhxcoc3h6o	-107.16	158.31	64.81	80.25	93.38	104.46	121.70	134.51	163.65
nc6h13coc3	-71.69	145.67	58.49	73.51	86.22	96.94	113.70	126.29	154.72
nc6h13coch	-30.77	117.86	45.44	56.94	66.74	75.07	88.25	98.11	117.06
nc6h13coch	-60.95	134.66	52.46	64.56	74.78	83.39	96.77	106.70	128.41
nc6h13coch	-96.05	139.10	54.23	66.46	76.88	85.71	99.55	109.86	132.16
nc6h13coch	-60.59	126.45	47.93	59.70	69.70	78.20	91.57	101.62	123.11
nc5h11coch	-25.82	108.49	39.98	49.98	58.49	65.73	77.18	85.77	102.34
nc5h11coch	-56.00	125.30	47.00	57.60	66.53	74.04	85.70	94.35	113.75
nc5h11coch	-91.11	129.74	48.77	59.50	68.63	76.37	88.48	97.51	117.49
nc5h11coch	-55.64	117.09	42.45	52.74	61.46	68.85	80.49	89.29	108.47
nc4h9coch2	-24.44	97.19	34.87	43.16	50.27	56.37	66.08	73.22	84.03
nc4h9coch2	-51.05	115.94	41.53	50.64	58.29	64.70	74.63	82.02	99.11
nc4h9coch2	-86.16	120.39	43.31	52.53	60.39	67.03	77.41	85.17	102.85
nc4h9coch2	-50.70	107.73	36.99	45.78	53.22	59.51	69.42	76.95	93.81
nc5h11coc3	-33.40	130.30	51.62	64.43	75.15	84.16	98.35	109.27	134.23
nc5h11coc3	-67.10	144.52	57.56	71.41	83.05	92.79	107.84	119.02	145.38
npecoc3h6o	-102.21	148.96	59.33	73.32	85.15	95.11	110.61	122.19	149.09
nc5h11coc3	-66.74	136.31	53.04	66.54	77.97	87.60	102.64	113.95	139.98
ch3coc5h9-	-42.08	107.05	37.67	46.99	55.04	61.97	72.97	81.11	96.28
c2h5coc5h9	-47.31	116.51	43.65	54.51	63.76	71.62	83.98	93.32	114.54
ch2coc5h9-	4.12	106.17	37.41	46.50	54.21	60.73	70.96	78.52	92.78
ch3coc5h8-	-1.88	104.53	37.61	46.51	54.01	60.37	70.42	77.98	92.30
ch3coc5h8-	-10.58	105.82	36.84	45.56	53.06	59.51	69.80	77.51	92.10
sc2h4coc5h	-7.11	114.47	43.48	53.81	62.54	69.91	81.46	90.29	110.84
c2h5coc5h8	-7.11	113.98	43.59	54.03	62.73	70.02	81.43	90.18	110.65
c2h5coc5h8	-15.81	115.30	42.83	53.08	61.78	69.16	80.81	89.72	110.44
Ac8oB	-30.77	117.86	45.44	56.94	66.73	75.07	88.26	98.11	117.07
c8oBqjA	-60.95	134.66	52.46	64.56	74.78	83.39	96.77	106.69	128.42
Cc8oBqA	-55.85	136.66	54.18	65.98	75.85	84.11	97.01	106.72	128.23
c8oBqAqjC	-83.96	154.11	59.88	73.26	84.36	93.51	107.24	117.00	139.81
nc5h11coc2	-28.46	120.94	46.16	57.47	66.91	74.82	87.28	96.93	119.59
nc5h11coc2	-62.16	135.16	52.10	64.45	74.80	83.44	96.76	106.69	130.65
nc5h11coc2	-97.26	139.60	53.87	66.35	76.90	85.77	99.55	109.85	134.35
nc5h11coc2	-61.80	126.95	47.56	59.60	69.73	78.25	91.55	101.62	125.39
c5h11coc2h	-62.16	135.16	52.10	64.45	74.80	83.44	96.76	106.69	130.65
c4h9chcoc2	-57.06	137.19	53.81	65.88	75.87	84.17	97.00	106.72	130.46
c4h9chqjco	-85.17	154.61	59.51	73.16	84.39	93.56	107.23	117.00	142.00
nc9h19coch	-45.61	145.94	61.85	77.81	91.47	103.10	121.48	135.11	161.05
nc9h19coch	-75.79	162.74	68.86	85.43	99.51	111.42	129.99	143.70	172.50
nc9h19coch	-110.89	167.17	70.63	87.33	101.61	113.75	132.78	146.86	176.28
nc9h19coch	-75.43	154.53	64.31	80.59	94.45	106.22	124.78	138.65	167.21
nc7h15coch	-35.72	127.22	50.91	63.90	74.98	84.42	99.33	110.44	131.69
nc7h15coch	-65.89	144.02	57.93	71.52	83.03	92.73	107.85	119.03	143.13
nc7h15coch	-101.00	148.46	59.69	73.42	85.13	95.06	110.62	122.20	146.89
nc7h15coch	-65.53	135.81	53.39	66.66	77.95	87.54	102.64	113.96	137.90
Ac9oB	-35.72	127.22	50.91	63.90	74.98	84.41	99.33	110.45	131.71
c9oBqjA	-65.89	144.02	57.93	71.52	83.02	92.73	107.85	119.03	143.08
Cc9oBqA	-60.80	146.04	59.64	72.95	84.10	93.46	108.08	119.06	142.90
c9oBqAqjC	-88.91	163.47	65.34	80.22	92.61	102.85	118.31	129.34	154.50
nc6h13coc2	-33.40	130.30	51.62	64.43	75.15	84.16	98.35	109.27	134.23
nc6h13coc2	-67.10	144.52	57.57	71.41	83.05	92.79	107.84	119.02	145.38
nc6h13coc2	-102.21	148.96	59.33	73.32	85.15	95.11	110.61	122.19	149.09
nc6h13coc2	-66.74	136.31	53.04	66.54	77.96	87.60	102.64	113.95	139.98
Ac9oC	-33.40	130.30	51.62	64.43	75.15	84.16	98.35	109.27	134.23
c9oCqjA	-67.10	144.52	57.56	71.42	83.05	92.79	107.83	119.03	145.28
Dc9oCqA	-62.01	146.57	59.28	72.84	84.12	93.51	108.07	119.06	145.10
c9oCqAqjD	-90.12	163.97	64.99	80.11	92.62	102.91	118.31	129.33	156.63
cyc6h9	29.45	74.34	24.70	33.91	41.57	47.84	57.10	63.66	73.05
chxe1rD	45.25	80.04	22.88	31.23	38.46	44.68	54.52	61.58	71.57
chd13	25.35	70.72	27.51	35.42	41.72	46.77	54.30	59.72	67.81
chd14	26.05	72.19	22.70	30.71	37.48	43.19	52.03	58.28	67.36
c6h7c	56.25	70.73	26.92	34.59	40.56	45.27	52.17	57.05	64.23
cyc6h9o	11.72	82.31	27.11	36.72	44.71	51.32	61.26	68.02	77.43
chxe1qjC	11.43	91.29	30.97	40.54	48.54	55.22	65.42	72.58	83.09
Echxe1qC	21.68	95.51	31.43	41.09	49.18	55.92	66.17	73.23	83.10

chxe1qCqjE	-13.17	107.24	39.33	50.15	58.98	66.18	76.80	83.94	94.12
chxe1oCqE	-53.29	99.30	34.60	43.77	51.43	57.80	67.48	74.18	83.70
chxe1oCojE	-16.90	90.54	28.67	36.98	43.93	49.71	58.52	64.64	73.43
Fc6e3oAoE	-18.67	103.31	32.37	39.86	46.11	51.31	59.20	64.68	72.58
Dc6e5oAoC	-10.95	104.74	31.68	39.39	45.78	51.07	59.03	64.52	72.43
Fc6e5oA	28.82	99.66	32.23	39.45	45.54	50.68	58.81	64.93	77.29
Fc6e2oA	11.12	98.62	32.11	39.86	46.39	51.87	60.33	66.36	75.36
Fc6h9-13	62.46	91.17	28.72	36.25	42.52	47.72	55.68	61.34	70.24
hex135	39.64	79.37	28.21	35.71	41.77	46.67	53.86	58.83	66.71
ac3h4hco1	41.05	78.19	20.85	25.61	29.64	33.05	38.32	42.04	47.27
sc3h5co	2.71	74.60	22.12	26.49	30.15	33.22	37.96	41.37	46.61
Ac6h9-15	79.29	92.16	28.57	35.78	41.90	47.06	55.11	60.91	69.75
CPD	32.10	65.52	18.13	24.46	30.12	34.82	41.22	45.87	52.36
c5h5	63.60	66.80	18.43	24.47	29.57	33.63	38.95	42.76	48.06
c5h4oh	12.31	74.13	22.17	28.67	33.79	37.81	43.53	47.43	52.78
c5h5o	53.00	72.40	19.99	26.39	31.74	36.11	42.48	46.88	53.28
c5h4o	13.20	69.31	19.45	24.69	29.19	32.91	38.32	42.23	47.76
cyc5h7	52.12	50.16	22.62	28.91	34.19	38.57	45.13	49.84	56.72
cyc5h8	7.82	69.61	19.55	26.55	33.10	38.73	46.75	52.67	61.08
hex1245	94.45	78.43	26.91	33.09	37.90	41.71	47.38	51.48	57.73
c6h615	98.95	81.13	26.77	32.13	36.42	39.97	45.67	50.20	58.35
mc6h6	80.35	71.53	25.52	33.93	39.76	43.94	49.81	53.79	59.51
fulvene	53.45	71.53	25.54	33.82	39.72	44.03	49.95	53.89	59.22
che24one	-12.74	51.92	27.81	35.33	41.39	46.25	53.31	58.02	64.98
c6h6	19.81	64.37	19.92	27.09	33.25	38.38	45.87	51.05	58.31
c6h5	79.44	69.83	21.01	27.06	32.43	37.05	43.90	47.77	53.26
c6h5o	10.36	74.89	24.79	31.31	37.08	42.01	49.25	53.28	58.98
c6h5oh	-25.01	76.95	25.43	32.11	38.09	43.28	51.12	55.68	62.24
c6h5o2	33.85	81.07	26.12	33.56	39.91	45.03	51.92	56.69	63.22
c6h4o2	-31.10	78.32	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00
c6h3o2	27.53	78.62	25.87	31.72	36.50	40.38	46.05	49.78	54.90
c6h3o3	-41.61	88.07	27.51	33.77	38.96	43.24	49.65	53.99	60.01
c6h5o2h	-.64	83.78	27.51	35.54	42.40	47.95	55.46	60.63	67.64
c5h4	111.08	70.90	20.98	25.09	28.46	31.23	35.38	38.30	42.92
c5h3	135.43	70.55	21.07	24.31	27.00	29.21	32.55	34.88	38.44
toluen	11.95	76.53	24.84	33.10	40.59	46.92	55.94	62.44	71.57
phch2	50.31	76.75	26.23	34.03	40.82	46.46	54.49	60.22	68.23
phch2oh	-24.05	87.32	28.19	36.68	44.01	50.20	59.61	66.46	76.64
phch2o	27.20	82.11	24.85	34.02	41.67	48.00	57.46	63.83	74.63
phhco	-8.75	83.34	25.95	33.27	39.83	45.45	53.81	59.72	67.92
phco	26.05	84.74	25.78	32.59	38.61	43.71	51.17	56.37	63.42
hoc6h4ch3	-30.77	84.41	30.27	39.13	46.45	52.48	61.53	67.74	76.86
oc6h4ch3	3.63	78.25	28.72	37.18	44.21	50.01	58.70	64.54	72.62
phc2h5	7.01	85.93	30.85	40.94	49.29	56.25	67.07	74.81	85.89
Aphc2h4	55.13	86.87	30.81	40.29	48.13	54.59	64.36	71.05	81.52
Bphc2h4	40.33	85.71	30.10	39.19	46.98	53.60	63.83	70.93	81.98
styren	35.24	82.31	29.28	38.37	45.88	52.03	61.18	67.71	77.21
ASTYRYL	92.54	82.19	28.75	37.09	43.99	49.68	58.16	63.82	72.96
BSTYRYL	82.34	81.23	27.39	35.45	42.42	48.35	57.42	63.55	73.36
phc2h	78.27	79.44	27.65	35.69	42.58	48.07	55.30	61.05	69.00
c6h4c2h3	93.74	82.65	28.30	36.85	43.77	49.34	57.38	62.59	69.63
phch2hco	-10.89	95.07	30.66	40.16	48.17	54.88	65.16	72.32	82.44
phch2co	26.01	96.19	29.83	38.73	46.21	52.46	62.00	68.59	77.80
phcoch2	88.82	94.61	31.18	39.88	47.16	53.23	62.46	68.85	77.90
c6h5cco	55.42	96.08	32.53	39.33	45.12	50.03	57.64	62.92	70.09
pbz	1.91	94.23	36.28	47.53	57.18	65.38	78.03	86.74	99.79
pbzjA	50.02	96.33	36.21	47.02	56.05	63.59	75.11	83.10	95.05
pbzjB	48.92	96.49	36.06	46.64	55.54	63.02	74.54	82.64	94.75
pbzjC	35.21	94.92	35.66	46.15	55.09	62.66	74.44	82.74	95.22
BPHPROPY	46.14	94.97	36.39	47.52	56.73	64.33	75.76	83.61	96.73
phc3h5-1	32.57	95.75	32.93	43.65	52.65	60.18	71.74	79.86	91.71
phc3h5-2	27.36	94.62	34.62	44.91	53.58	60.85	72.06	79.97	91.59
phc3h4	63.47	92.06	34.09	44.27	52.72	59.71	70.27	77.55	88.06
phc3h3	17.23	115.44	36.94	46.73	54.83	61.49	71.40	78.02	86.79
phc2h4hco	-17.15	102.43	37.85	48.49	57.44	64.93	76.42	84.45	96.05
phc2h4co	19.75	103.55	37.01	47.05	55.48	62.51	73.25	80.72	91.40
phch2coch2	24.40	106.14	36.40	46.47	54.93	62.02	72.91	80.57	91.68
phcoc2h4	83.50	104.21	37.34	47.40	55.81	62.83	73.57	81.10	92.10
phc2h2hco	2.39	94.64	36.27	46.49	54.88	61.74	71.92	78.81	88.72
phc2h2co	41.32	96.32	31.07	41.19	49.99	57.55	69.36	77.86	94.48
phcoc2h3	6.06	102.34	33.85	42.84	50.83	57.81	68.74	75.62	78.75
Bphc3h5ohA	12.68	109.04	39.22	50.28	59.43	67.02	78.60	86.70	99.60
Aphc3h5ohB	9.83	107.77	40.02	51.06	60.43	68.31	80.20	87.55	88.91
Cphc3h5ohB	-5.67	106.77	39.52	50.28	59.51	67.37	79.41	86.99	88.89
Bphc3h5ohC	9.33	112.21	37.75	49.25	58.90	66.95	79.21	87.67	99.63
pbzohAqjB	-22.28	123.77	45.88	58.04	68.16	76.53	89.11	97.63	109.16
pbzohBqjA	-22.28	123.77	45.88	58.04	68.16	76.53	89.11	97.63	109.16
pbzohBqjC	-25.52	123.94	45.69	58.24	68.61	77.14	89.81	98.28	109.60
pbzohCqjB	-25.52	123.94	45.69	58.24	68.61	77.14	89.81	98.28	109.60
Cophc3h4-1	44.92	102.06	35.68	46.76	55.89	63.36	74.44	81.87	92.32
Aophc3h4-2	44.27	97.71	35.40	46.55	55.65	63.02	73.79	81.31	100.48
ch3c6h4c2h	27.55	92.86	34.75	44.61	53.04	60.22	71.52	79.69	91.68
ch3c6h4c2h	-.64	96.54	36.46	47.54	56.99	65.03	77.61	86.59	99.70
c14h14	34.21	115.50	49.35	66.12	79.80	91.02	108.07	120.07	136.61
napht	36.00	79.66	31.84	42.96	52.41	60.16	71.20	78.67	88.85
biphenyl	43.54	92.94	40.08	53.21	64.41	73.65	86.88	95.87	108.13
c10h9	54.86	86.92	34.47	45.92	55.84	63.97	75.24	83.17	94.07
c10h10	28.00	85.89	34.63	46.48	56.96	65.66	77.84	86.49	98.46
U-c6h5	140.96	79.55	26.90	31.87	36.27	40.04	45.65	48.93	53.93
c6h4c2h	133.60	78.83	26.98	34.62	40.71	45.55	52.57	57.38	64.37
A1c2hAC	146.52	94.86	36.63	45.92	53.45	59.54	68.56	74.85	84.11
A2-X	94.40	83.44	31.57	41.92	50.50	57.51	67.79	74.77	84.74
A2O	34.80	102.80	20.38	30.60	39.45	46.92	58.28	66.78	88.60
A2oh	-8.06	90.30	38.04	48.46	57.47	65.03	76.22	83.79	103.10
A1c2h3AC	105.16	104.06	36.54	45.29	52.13	57.28	64.40	72.18	80.90
indenyl	80.44	93.85	17.01	28.19	37.97	46.33	59.19	68.58	82.16
phc4h9	-2.91	105.00	41.86	54.86	65.83	75.08	89.36	99.46	114.26
Aphc4h8	46.09	108.42	41.09	53.47	63.92	72.69	86.20	95.71	109.61
Bphc4h8	43.44	109.44	40.28	52.49	62.89	71.71	85.43	95.13	109.03
Cphc4h8	43.44	109.44	40.28	52.49	62.89	71.71	85.43	95.13	109.03
Dphc4h8	31.49	101.33	42.75	54.90	65.19	73.86	87.28	96.78	110.60
Dphsecb	44.70	110.67	40.88	53.42	63.96	72.80	86.37	95.91	109.89
phc4h7-3	22.60	100.86	39.78	51.79	61.87	70.32	83.30	92.45	105.94
phc4h7-2	24.70	102.96	38.14	50.16	60.35	68.95	82.30	91.80	105.70
phc4h7-1	27.24	103.31	39.06	51.30	61.56	70.10	83.14	92.22	105.46
Bphc4h6-3	68.96	105.30	38.15	49.41	58.95	66.98	79.38	88.12	100.70
Cphc4h6-1	73.60	107.75	37.49	48.94	58.61	66.73	79.20	87.89	100.22
Dphc4h6-1	61.65	99.64	39.97	51.39	60.95	68.92	81.09	89.56	101.81
phc4h5	48.79	95.23	38.44	49.87	59.25	66.92	78.34	86.16	97.80
phc4h8ojA	13.25	115.55	44.06	57.02	67.92	77.05	91.07	100.91	115.18
phc4h8ojB	8.88	113.56	44.64	57.77	68.73	77.85	91.72	101.37	115.41
phc4h8ojC	8.88	113.56	44.64	57.77	68.73	77.85	91.72	101.37	115.41
phc4h8ojD	10.01	113.54	43.81	57.21	68.39	77.69	91.77	101.49	115.39
phc4h8qjA	11.96	124.88	47.93	60.91	71.86	81.08	95.33	105.45	120.24

phc4h8qjB	8.59	123.51	48.42	61.61	72.66	81.89	96.01	105.93	120.48
phc4h8qjC	8.59	123.51	48.42	61.61	72.66	81.89	96.01	105.93	120.48
phc4h8qjD	9.72	123.49	47.74	61.10	72.30	81.67	96.03	106.11	120.74
bbzqA	-24.14	124.66	49.97	87.95	92.98	97.64	105.89	112.86	125.60
bbzqB	-27.51	123.29	50.31	88.88	93.83	98.42	106.54	113.40	125.93
bbzqC	-27.51	123.29	50.31	88.88	93.83	98.42	106.54	113.40	125.93
bbzqD	-26.38	123.27	49.66	89.11	94.07	98.66	106.80	113.66	126.18
bbzqDrD	15.12	130.47	49.85	62.71	73.54	82.63	96.64	106.55	120.95
bbzqDrC	19.97	127.71	48.14	61.66	72.99	82.43	96.82	106.78	120.92
bbzqDrB	19.97	127.71	48.14	61.66	72.99	82.43	96.82	106.78	120.92
bbzqDrA	22.62	125.88	48.87	62.63	74.03	83.45	97.65	107.43	121.51
bbzqCrD	6.89	119.62	51.20	64.60	75.72	84.90	98.75	108.29	122.01
bbzqCrC	13.36	125.98	50.02	62.63	73.19	82.02	95.38	103.85	107.09
bbzqCrB	18.84	127.73	48.81	62.17	73.34	82.64	96.79	106.58	120.60
bbzqCrA	21.49	125.90	49.60	63.18	74.42	83.70	97.65	107.27	121.27
bbzqBrD	6.89	119.62	51.20	64.60	75.72	84.90	98.75	108.29	122.01
bbzqBrC	18.84	127.73	48.81	62.17	73.34	82.64	96.79	106.58	120.60
bbzqBrB	13.36	125.98	50.02	62.63	73.19	82.02	95.38	103.85	107.09
bbzqBrA	21.49	125.90	49.60	63.18	74.42	83.70	97.65	107.27	121.27
bbzqArD	10.26	120.99	50.83	63.87	74.81	83.95	97.96	107.74	121.70
bbzqArC	22.21	129.10	48.25	61.43	72.53	81.84	96.11	106.07	120.22
bbzqArB	22.21	129.10	48.25	61.43	72.53	81.84	96.11	106.07	120.22
bbzqArA	-16.11	137.82	53.82	68.26	80.38	90.40	104.95	113.52	118.64
bbzqDqjC	-14.88	142.58	56.13	70.72	82.75	92.64	107.41	117.47	131.78
bbzqDqjB	-14.88	142.58	56.13	70.72	82.75	92.64	107.41	117.47	131.78
bbzqDqjA	-10.51	143.20	55.55	69.99	81.96	91.85	106.76	117.00	131.55
bbzqCqjD	-14.88	142.58	56.13	70.72	82.75	92.64	107.41	117.47	131.78
bbzqCqjB	-16.01	142.60	56.70	71.18	83.10	92.87	107.43	117.34	131.58
bbzqCqjA	-11.64	143.22	56.21	70.56	82.41	92.17	106.81	116.87	131.35
bbzqBqjD	-14.88	142.58	56.13	70.72	82.75	92.64	107.41	117.47	131.78
bbzqBqjC	-16.01	142.60	56.70	71.18	83.10	92.87	107.43	117.34	131.58
bbzqBqjA	-11.64	143.22	56.21	70.56	82.41	92.17	106.81	116.87	131.35
bbzqAqjD	-10.51	143.20	55.55	69.99	81.96	91.85	106.76	117.00	131.55
bbzqAqjC	-11.64	143.22	56.21	70.56	82.41	92.17	106.81	116.87	131.35
bbzqAqjB	-11.64	143.22	56.21	70.56	82.41	92.17	106.81	116.87	131.35
bbzoCqD	-51.92	129.34	-13.48	35.06	195.66	393.24	706.36	795.44	824.44
bbzoBqD	-53.00	129.44	50.56	63.97	75.15	84.44	98.51	108.25	122.15
bbzoAqD	-45.55	130.52	51.33	64.64	75.72	84.91	98.83	108.45	122.21
bbzoDqC	6.43	127.25	51.12	64.92	76.30	85.65	99.60	109.08	122.52
bbzoBqC	-52.66	129.18	50.25	64.02	75.42	84.83	98.95	108.59	122.25
bbzoAqC	-46.68	130.54	52.00	65.16	76.09	85.14	98.81	108.26	121.93
bbzoDqB	4.96	127.53	52.16	65.41	76.39	85.46	99.14	108.56	122.18
bbzoCqB	-53.05	129.36	50.96	64.59	75.84	85.09	98.96	108.47	122.18
bbzoAqB	-45.21	130.26	51.01	64.69	76.00	85.32	99.27	108.78	122.29
bbzoDqA	9.33	128.15	51.60	64.68	75.59	84.67	98.47	108.07	121.91
bbzoCqA	-50.15	130.26	51.38	64.32	75.12	84.11	97.83	107.46	121.56
bbzoBqA	-48.28	129.88	51.87	64.49	75.10	84.02	97.75	107.47	121.59
bbzohDrC	4.40	119.44	43.21	56.19	67.12	76.27	90.28	99.99	113.80
bbzohCrD	-8.68	111.35	46.46	59.13	69.72	78.55	92.03	101.47	115.36
bbzohCrB	3.27	119.46	43.91	56.68	67.41	76.41	90.19	99.81	113.78
bbzohBrC	49.62	123.90	41.96	54.36	64.67	73.24	86.24	95.29	108.62
bbzohArB	7.64	121.45	43.38	55.96	66.63	75.64	89.55	99.31	113.25
bbzohBrA	5.92	119.81	44.74	57.67	68.44	77.38	90.96	100.40	114.36
bbzohDqjC	-30.45	133.91	51.35	65.28	76.82	86.37	100.79	110.80	125.45
bbzohCqjD	-30.45	133.91	51.35	65.28	76.82	86.37	100.79	110.80	125.45
bbzohCqjB	-31.58	133.93	52.02	65.79	77.18	86.59	100.77	110.62	125.19
bbzohBqjC	-31.58	133.93	52.02	65.79	77.18	86.59	100.77	110.62	125.19
bbzohAqjB	-27.21	134.55	51.49	65.07	76.39	85.80	100.11	110.14	124.96
bbzohBqjA	-27.21	134.55	51.49	65.07	76.39	85.80	100.11	110.14	124.96
bbze3ojB	35.42	107.57	42.32	54.82	65.11	73.54	86.04	94.48	106.49
bbze1ojC	40.06	110.02	40.67	54.15	65.07	73.85	86.54	94.79	106.41
bbze1ojD	40.16	110.48	41.00	53.66	64.12	72.72	85.55	94.25	106.58
bbzoA	-22.08	111.85	43.35	55.46	65.68	74.26	87.49	96.80	110.37
bbzoB	-29.53	110.77	42.65	54.82	65.11	73.77	87.17	96.67	110.54
bbzoC	-29.92	110.95	43.26	55.35	65.52	74.05	87.19	96.46	110.01
bbzoD	29.56	108.84	43.61	55.75	65.97	74.56	87.80	97.19	111.00
phc3h6co	14.82	114.35	42.51	54.03	63.72	71.85	84.32	93.07	105.73
phhcco	28.97	54.88	24.14	31.86	38.33	43.66	51.50	56.53	64.37
phc4h7o-AB	1.25	108.24	40.41	54.34	65.71	74.97	88.66	97.94	111.70
phc4h7o-AC	.23	104.71	38.48	52.61	64.24	73.77	87.97	97.67	111.91
phc4h7o-AD	-19.24	97.71	35.21	50.07	62.35	72.44	87.50	97.72	112.28
phc4h7o-BC	-3.12	107.62	41.06	55.09	66.50	75.74	89.31	98.46	112.10
phc4h7o-BD	-3.01	104.06	38.49	52.86	64.66	74.30	88.63	98.39	112.68
phc4h7o-CD	-1.99	107.60	40.38	54.57	66.13	75.52	89.33	98.65	112.39
bbzoArB	15.62	111.52	43.95	55.12	64.54	72.46	84.69	93.35	106.11
bbzoArC	24.27	117.67	41.82	53.14	62.77	70.93	83.59	92.49	105.05
bbzoArD	12.32	109.56	44.20	55.52	65.06	73.08	85.42	94.10	106.73
bbzoBrA	12.77	113.17	42.98	54.95	64.92	73.20	85.74	94.43	107.09
bbzoBrC	12.77	113.17	42.98	54.95	64.92	73.20	85.74	94.43	107.09
bbzoBrD	4.87	110.66	43.53	54.88	64.47	72.55	85.07	93.96	106.97
bbzoCrA	20.41	117.80	40.84	52.62	62.57	70.93	83.84	92.98	106.25
bbzoCrB	13.71	114.03	41.92	54.15	64.33	72.78	85.60	94.51	107.44
bbzoCrD	3.51	111.23	41.79	53.25	63.01	71.29	84.25	93.54	107.16
bbzoDrA	21.77	109.70	43.25	54.95	64.72	72.86	85.30	94.06	107.07
bbzoDrB	19.12	111.53	42.34	53.94	63.72	71.93	84.55	93.38	106.01
bbzoDrC	15.07	105.93	44.36	56.46	66.44	74.67	87.03	95.58	108.29
cyc6h12	-29.55	70.93	27.27	37.35	46.70	54.84	67.08	75.77	87.83
cyc6h11	17.95	75.83	26.12	35.82	44.67	52.32	63.77	71.90	83.21
cyc6h10	-.85	74.34	25.29	34.76	42.73	49.33	59.21	66.30	76.66
chxone	-55.00	77.00	26.32	36.31	45.07	52.68	64.81	73.44	84.67
Bchxone	-14.80	78.18	25.58	35.10	43.38	50.52	61.82	69.78	80.09
Cchxone	-8.40	78.25	25.90	35.46	43.75	50.87	62.07	69.95	80.18
Dchxone	-7.60	78.25	25.90	35.46	43.75	50.87	62.07	69.95	80.18
chxe2oA	-28.69	83.35	26.07	34.12	41.01	46.89	56.14	62.78	72.42
chxe3oA	-27.71	81.84	26.48	34.63	41.56	47.43	56.57	63.07	72.49
Dchxe2oA	4.81	79.54	24.55	32.30	38.92	44.56	53.38	59.63	68.40
chxqjA	-20.83	90.59	31.83	42.42	51.60	59.51	72.00	80.86	92.83
chxqArC	-7.88	96.18	32.01	42.94	52.32	60.32	72.77	81.41	92.60
chxo-AC	-9.03	62.62	19.99	31.36	40.94	48.95	61.14	69.48	80.89
chxqAqjC	-45.48	107.42	40.27	51.76	61.55	69.84	82.64	91.48	103.22
chxoAqC	-81.25	97.69	35.27	45.81	54.85	62.54	74.50	82.84	93.85
chxqAqCrE	-32.53	111.64	41.67	53.11	62.86	71.11	83.78	92.42	103.48
chxoAojC	-44.80	88.05	29.44	39.34	47.81	55.02	66.25	74.11	84.55
Fc6oAoC	-39.43	106.40	34.75	42.65	49.42	55.21	64.34	70.95	80.54
Fc6oAoE	-43.61	107.79	36.90	44.37	50.77	56.25	64.89	71.13	80.19
c6e5oAqC	-53.79	116.14	41.52	50.10	57.34	63.44	72.88	79.61	89.61
c6e5oAojC	-17.35	106.50	35.65	43.61	50.31	55.93	64.64	70.84	80.18
Fc6e1oC	8.35	100.64	32.20	39.52	45.76	51.08	59.51	65.72	75.38
c6e5oA	-29.14	99.31	33.00	40.72	47.39	53.13	62.26	68.95	78.94
c6e5oyA	7.76	100.43	32.16	39.29	45.43	50.71	59.10	65.21	74.29
Ac6e5oC	13.25	98.15	31.24	38.90	45.44	51.02	59.81	66.18	75.59
Ac6e5oB	5.71	99.25	32.64	40.22	46.64	52.06	60.51	66.60	75.77
chxoqjB	-42.52	99.58	34.81	44.49	52.62	59.43	69.92	77.37	88.42
DchxoqB	-32.27	103.80	35.14	45.00	53.28	60.19	70.71	77.96	88.03

chxoqBqjD	-67.13	115.53	43.49	54.11	62.96	70.29	81.32	88.79	98.72
chxoAoBqD	-98.88	108.77	37.98	47.02	54.70	61.20	71.31	78.50	88.77
chxoAoBojD	-62.49	100.01	32.01	40.22	47.22	53.16	62.41	68.96	78.25
c6e5oAoB	-49.51	102.99	33.39	40.92	47.32	52.72	61.12	67.10	75.84
c6e5oyAoB	-12.61	104.11	32.57	39.49	45.36	50.30	57.96	63.39	71.26
Fc6oAoDoE	-65.49	112.56	36.86	43.79	49.74	54.83	62.89	68.74	77.20
Fc6oAoCoD	-57.50	116.93	34.30	41.48	47.67	52.99	61.44	67.58	76.45
Ac6e3e5oB	25.46	90.61	30.59	37.98	43.96	48.81	55.95	60.87	68.66
chxoAoD	-83.34	88.33	32.50	39.95	46.39	51.94	60.82	67.38	77.29
BchxoAoD	-44.52	88.56	28.78	37.31	44.50	50.53	59.83	66.63	81.43
chxe2oAoD	-68.08	59.79	32.29	39.27	45.03	49.79	57.02	62.12	69.90
c6e1oCoyF	-22.92	103.82	33.64	40.08	45.57	50.25	57.63	63.05	71.23
Echxe2oAoD	-25.77	58.63	31.17	37.68	43.04	47.44	54.04	58.62	65.42
c6e2e5oyAo	-11.68	93.37	31.30	37.77	42.99	47.17	53.25	57.34	63.56
ch2coch2hc	-35.88	84.99	24.16	29.67	34.29	38.13	43.94	47.86	52.98
mch	-36.04	81.02	32.42	44.53	55.08	64.20	78.61	88.82	103.09
mchA	12.06	83.11	32.35	44.02	53.95	62.40	75.68	85.19	98.41
mchB	11.36	82.73	32.04	43.49	53.34	61.79	75.19	84.80	98.20
mche1	-8.39	80.58	29.36	41.07	51.10	59.59	72.62	81.48	94.13
Amche1	49.71	81.62	28.69	39.87	49.29	57.19	69.26	77.51	89.29
Cmche1	25.79	77.35	26.77	37.87	47.44	55.62	68.43	77.41	89.32
Dmche1	39.74	88.43	29.22	39.09	47.56	54.81	66.19	74.34	86.09
BmchohA	-28.35	95.38	33.31	45.04	55.23	64.02	77.96	87.92	101.61
mchohAqjB	-58.78	128.88	40.68	53.38	64.46	74.07	89.33	100.16	114.29
mche13	17.16	77.60	28.83	38.97	47.38	54.32	64.82	72.11	82.96
mche14	20.24	81.94	29.09	38.56	46.56	53.30	63.73	71.11	82.01
Emche13	41.72	77.77	28.91	38.74	46.86	53.47	62.97	68.88	78.67
Gmche13	41.72	77.77	28.91	38.74	46.86	53.47	62.97	68.88	78.67
Fmche14	53.74	78.13	27.60	36.74	44.46	50.95	60.95	67.98	78.10
Gmche14	53.74	78.13	27.60	36.74	44.46	50.95	60.95	67.98	78.10
mche135	43.97	75.90	27.97	36.81	44.05	49.95	58.72	64.76	74.33
mche136	37.58	69.92	28.51	37.68	45.07	51.01	59.64	65.41	74.08
mche1oC	-34.72	87.11	29.75	40.24	49.24	56.93	68.99	77.53	89.25
mchoA	-55.45	88.69	31.05	42.85	53.05	61.81	75.59	85.31	98.31
mche2oA	-34.19	83.60	29.54	40.82	50.35	58.36	70.54	78.80	89.46
chxco	-18.55	89.81	30.23	41.42	51.09	59.39	72.43	81.58	93.68
mche2oya	2.71	84.72	28.70	39.38	48.40	55.94	67.39	75.08	84.82
mchoAoC	-81.71	97.68	34.11	44.50	53.33	60.82	72.49	80.80	92.82
mchoyAoC	-44.80	98.80	33.24	43.04	51.36	58.40	69.32	77.06	88.17
mchoAoD	-82.47	94.64	32.33	43.88	53.65	61.84	74.26	82.54	92.46
mchoyAoD	-45.56	95.76	31.51	42.77	52.18	59.97	71.57	79.09	87.82
AmchoD	-13.66	95.22	33.71	43.71	52.26	59.53	70.93	79.13	91.14
AmchoC	-14.29	92.58	30.16	41.34	50.98	59.22	72.14	81.23	93.45
Ec5oA	-6.18	93.63	29.90	36.67	42.28	46.98	54.43	60.20	72.43
Gc7h13-1	34.10	106.67	36.27	45.72	53.87	60.88	72.04	80.23	92.60
c7e6oyA	2.83	109.85	37.66	46.27	53.68	60.05	70.17	77.57	88.62
Gc7e1oC	2.92	110.47	37.80	46.50	53.95	60.32	70.45	77.93	89.51
Ec5e1oC	12.78	91.63	26.79	32.53	37.44	41.64	48.32	53.24	60.76
Ac7e6oB	.78	108.67	38.15	47.20	54.88	61.39	71.58	78.94	90.04
Gc7e1oD	8.32	112.84	36.70	45.57	53.17	59.67	69.97	77.54	89.04
Ac5e4oB	11.75	90.05	26.12	32.58	38.00	42.55	49.54	54.49	61.81
Gc7e1oF	.78	108.67	38.20	47.20	54.86	61.37	71.57	78.94	89.90
ech	-41.12	91.21	38.09	51.85	63.77	73.99	90.03	101.35	118.22
echA	6.92	93.54	38.02	51.34	62.63	72.20	87.11	97.71	113.53
eche1	-10.55	89.05	37.64	50.42	61.50	71.01	85.89	96.30	110.80
Aeche1	48.26	90.14	37.00	49.20	59.65	68.56	82.50	92.30	105.94
Ceche1	20.02	85.69	31.58	44.01	54.81	64.12	78.85	89.30	103.32

eche1e3	12.23	87.02	34.35	45.95	55.61	63.64	75.87	84.43	97.17
eche2oA	-37.31	96.79	33.72	47.03	58.56	68.46	84.09	95.28	112.28
echoA	-60.85	97.92	37.44	50.41	61.65	71.31	86.54	97.31	111.87
echoyA	-23.95	99.04	36.61	48.98	59.69	68.90	83.39	93.60	107.28
AechoB	-25.53	98.05	36.18	49.29	60.52	70.08	84.93	95.25	108.94
AechoE	-18.59	104.64	39.18	50.68	60.50	68.87	82.00	91.46	105.35
eche1oE	-37.19	98.16	37.17	48.54	58.18	66.31	78.95	87.95	101.20
AechoD	-19.22	102.00	35.67	48.32	59.22	68.55	83.21	93.58	107.74
echoAoD	-87.40	104.06	37.94	50.32	60.99	70.13	84.48	94.64	108.44
echoyAoD	-50.49	105.18	37.10	48.89	59.03	67.71	81.32	90.91	103.81
decalin	-44.12	87.33	39.81	56.79	71.26	83.53	102.68	116.31	136.07
odecal	-21.56	107.84	44.51	60.32	73.97	85.68	104.15	117.31	135.71
c10h8	35.99	80.40	32.66	43.93	53.14	60.61	71.59	78.90	89.36
tetralin	5.74	88.10	35.76	49.10	60.29	69.63	83.82	93.57	107.26
khdeca	-58.86	60.43	26.54	36.66	45.19	52.37	63.51	71.55	84.35
indene	39.05	80.53	29.61	39.65	48.17	55.32	66.14	73.37	84.48
xylene	4.33	84.12	30.22	39.95	48.44	55.79	67.38	75.45	87.59
bzfur	4.06	77.96	26.94	36.10	44.06	50.55	59.36	65.46	73.75
dcyc5	-44.12	87.33	39.81	56.79	71.26	83.53	102.68	116.31	136.07
rtetralin	39.04	82.98	34.10	47.41	58.72	68.24	82.81	92.71	105.50
rtetraoo	15.35	101.43	39.04	54.17	66.61	76.74	91.33	100.33	109.67
rodeca	2.23	94.52	38.23	54.45	68.34	80.19	98.76	111.97	130.84
rdecalin	2.23	94.52	38.23	54.45	68.34	80.19	98.76	111.97	130.84
rdecoo	-18.13	90.59	31.83	42.42	51.60	59.51	72.00	80.86	92.83
qdecooh	-18.13	90.59	31.83	42.42	51.60	59.51	72.00	80.86	92.83
zdeca	-18.13	90.59	31.83	42.42	51.60	59.51	72.00	80.86	92.83
indenyl	74.98	77.18	29.02	38.73	46.82	53.53	63.66	70.57	80.08
rcresolo	3.73	83.81	27.52	35.98	43.02	48.81	57.39	63.24	75.82
rxylene	40.22	83.73	31.50	40.42	48.05	54.55	64.73	72.02	83.19
c6h4ch3	71.36	81.56	24.60	32.20	38.69	44.18	52.62	58.39	67.34
pch	-46.61	100.49	41.54	56.80	70.02	81.41	99.46	112.39	130.45
pchA	2.39	103.10	40.76	55.42	68.11	79.03	96.30	108.64	125.80
pchB	-.26	104.93	39.92	54.43	67.09	78.05	95.53	108.05	125.22
pchC	-.26	104.93	39.92	54.43	67.09	78.05	95.53	108.05	125.22
pchD	-2.41	103.58	41.20	55.52	68.00	78.80	96.00	108.39	125.65
pchE	-.26	102.74	39.92	54.43	67.09	78.05	95.53	108.05	125.22
pchF	-.26	102.74	39.92	54.43	67.09	78.05	95.53	108.05	125.22
pchG	-.26	102.74	39.92	54.43	67.09	78.05	95.53	108.05	125.22
pchqjA	-30.74	118.65	47.49	62.85	76.10	87.47	105.43	118.31	136.39
pchqjB	-35.11	118.84	48.10	63.58	76.87	88.24	106.10	118.84	136.72
pchqjC	-35.11	118.84	48.10	63.58	76.87	88.24	106.10	118.84	136.72
pchqjD	-37.54	117.77	48.46	63.92	77.18	88.50	106.28	118.96	136.81
pchqjE	-35.11	118.84	48.10	63.58	76.87	88.24	106.10	118.84	136.72
pchqjF	-35.11	118.84	48.10	63.58	76.87	88.24	106.10	118.84	136.72
pchqjG	-35.11	118.84	48.10	63.58	76.87	88.24	106.10	118.84	136.72
pchqA	-66.85	118.43	49.54	65.75	79.66	91.53	110.12	123.28	141.47
pchqB	-71.22	118.62	50.13	66.47	80.43	92.30	110.80	123.83	141.82
pchqC	-71.22	118.62	50.13	66.47	80.43	92.30	110.80	123.83	141.82
pchqD	-73.65	117.55	50.55	66.87	80.79	92.61	110.98	123.92	141.87
pchqE	-71.22	118.62	50.13	66.47	80.43	92.30	110.80	123.83	141.82
pchqF	-71.22	118.62	50.13	66.47	80.43	92.30	110.80	123.83	141.82
pchqG	-71.22	118.62	50.13	66.47	80.43	92.30	110.80	123.83	141.82
pchojA	-30.45	109.67	43.62	58.95	72.15	83.45	101.20	113.80	131.26
pchojB	-34.82	109.86	44.23	59.70	72.94	84.21	101.83	114.28	131.62
pchojC	-34.82	109.86	44.23	59.70	72.94	84.21	101.83	114.28	131.62
pchojD	-37.25	108.79	44.67	60.07	73.26	84.49	102.03	114.44	131.74
pchojE	-34.82	109.86	44.23	59.70	72.94	84.21	101.83	114.28	131.62

pchojF	-34.82	109.86	44.23	59.70	72.94	84.21	101.83	114.28	131.62
pchojG	-34.82	109.86	44.23	59.70	72.94	84.21	101.83	114.28	131.62
ApchqA	-22.94	122.25	49.65	64.88	78.00	89.25	106.93	119.50	136.79
BpchqA	-17.84	121.19	48.88	64.44	77.78	89.17	106.97	119.55	136.82
CpchqA	-20.49	122.87	47.83	63.36	76.75	88.22	106.25	118.96	136.14
DpchqA	-22.64	121.52	49.19	64.46	77.63	88.91	106.67	119.30	136.68
EpchqA	-20.49	122.87	47.83	63.36	76.75	88.22	106.25	118.96	136.14
FpchqA	-20.49	122.87	47.83	63.36	76.75	88.22	106.25	118.96	136.14
GpchqA	-20.49	122.87	47.83	63.36	76.75	88.22	106.25	118.96	136.14
ApchqB	-22.21	121.35	49.46	65.17	78.58	89.96	107.67	120.10	137.17
BpchqB	-29.71	124.60	50.11	65.08	78.02	89.12	106.67	119.21	136.62
CpchqB	-22.21	121.38	49.47	65.16	78.56	89.94	107.64	120.07	137.15
DpchqB	-27.01	121.71	49.78	65.19	78.41	89.69	107.35	119.83	137.01
EpchqB	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
FpchqB	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
GpchqB	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
ApchqC	-22.21	121.23	49.35	65.09	78.52	89.92	107.64	120.08	137.16
BpchqC	-22.21	121.38	49.47	65.16	78.56	89.94	107.64	120.07	137.15
CpchqC	-29.71	124.60	50.11	65.08	78.02	89.12	106.67	119.21	136.62
DpchqC	-27.01	121.71	49.78	65.19	78.41	89.69	107.35	119.83	137.01
EpchqC	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
FpchqC	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
GpchqC	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
ApchqD	-24.64	120.16	49.77	65.49	78.88	90.22	107.83	120.18	137.22
BpchqD	-27.29	121.99	48.88	64.48	77.85	89.26	107.06	119.58	136.63
CpchqD	-24.64	120.31	49.89	65.55	78.91	90.23	107.82	120.18	137.21
EpchqD	-24.64	120.31	49.89	65.55	78.91	90.23	107.82	120.18	137.21
FpchqD	-27.29	121.99	48.88	64.48	77.85	89.26	107.06	119.58	136.63
GpchqD	-27.29	121.99	48.88	64.48	77.85	89.26	107.06	119.58	136.63
ApchqE	-22.21	121.23	49.35	65.09	78.52	89.92	107.64	120.08	137.16
BpchqE	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
CpchqE	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
DpchqE	-27.01	121.71	49.78	65.19	78.41	89.69	107.35	119.83	137.01
EpchqE	-29.71	124.60	50.11	65.08	78.02	89.12	106.67	119.21	136.62
FpchqE	-22.21	121.38	49.47	65.16	78.56	89.94	107.64	120.07	137.15
GpchqE	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
HpchqE	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
ApchqF	-22.21	121.23	49.35	65.09	78.52	89.92	107.64	120.08	137.16
BpchqF	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
CpchqF	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
DpchqF	-27.01	121.71	49.78	65.19	78.41	89.69	107.35	119.83	137.01
EpchqF	-22.21	121.38	49.47	65.16	78.56	89.94	107.64	120.07	137.15
FpchqF	-29.71	124.60	50.11	65.08	78.02	89.12	106.67	119.21	136.62
GpchqF	-22.21	121.38	49.47	65.16	78.56	89.94	107.64	120.07	137.15
ApchqG	-22.21	121.23	49.35	65.09	78.52	89.92	107.64	120.08	137.16
BpchqG	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
CpchqG	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
DpchqG	-27.01	121.71	49.78	65.19	78.41	89.69	107.35	119.83	137.01
EpchqG	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
FpchqG	-22.21	121.38	49.47	65.16	78.56	89.94	107.64	120.07	137.15
GpchqG	-29.71	124.60	50.11	65.08	78.02	89.12	106.67	119.21	136.62
IpchqE	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
HpchqF	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
IpchqF	-24.86	123.06	48.36	64.07	77.54	89.01	106.89	119.42	136.43
pchqAqjA	-60.97	133.15	56.86	73.21	87.16	99.00	117.40	130.29	147.87
pchqAqjB	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqAqjC	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqAqjD	-57.77	133.53	56.48	72.88	86.82	98.64	116.96	129.85	147.66
pchqAqjE	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqAqjF	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqAqjG	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqBqjA	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqBqjB	-64.37	132.65	56.71	72.98	86.88	98.68	117.07	130.01	147.78
pchqBqjC	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqBqjD	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqBqjE	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqBqjF	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqBqjG	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqCqjA	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqCqjB	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqCqjC	-64.37	132.65	56.71	72.98	86.88	98.68	117.07	130.01	147.78
pchqCqjD	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqCqjE	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqCqjF	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqCqjG	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqDqjA	-57.77	133.53	56.48	72.88	86.82	98.64	116.96	129.85	147.66
pchqDqjB	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqDqjC	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqDqjE	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqDqjF	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqDqjG	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqEqjA	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqEqjB	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqEqjC	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqEqjD	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqEqjE	-64.37	132.65	56.71	72.98	86.88	98.68	117.07	130.01	147.78
pchqEqjF	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqEqjG	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqEqjH	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqEqjI	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqFqjA	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqFqjB	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqFqjC	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqFqjD	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqFqjE	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqFqjF	-64.37	132.65	56.71	72.98	86.88	98.68	117.07	130.01	147.78
pchqFqjG	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqFqjH	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqFqjI	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqGqjA	-55.34	134.60	55.97	72.47	86.51	98.39	116.80	129.72	147.54
pchqGqjB	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqGqjC	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqGqjD	-62.14	133.72	56.97	73.58	87.63	99.45	117.64	130.33	147.90
pchqGqjE	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqGqjF	-59.71	134.79	56.49	73.19	87.32	99.20	117.48	130.20	147.78
pchqGqjG	-64.37	132.65	56.71	72.98	86.88	98.68	117.07	130.01	147.78
pchoAqB	-88.92	123.01	50.64	66.63	80.21	91.68	109.38	121.66	138.25
pchoAqC	-90.39	123.29	51.65	67.10	80.29	91.49	108.91	121.15	137.91
pchoAqD	-92.82	122.22	52.01	67.46	80.62	91.78	109.10	121.25	137.94
pchoAqE	-90.39	123.29	51.65	67.10	80.29	91.49	108.91	121.15	137.91
pchoBqA	-91.99	124.00	51.38	66.39	79.33	90.42	107.88	120.32	137.43
pchoBqC	-96.37	124.11	49.88	65.95	79.63	91.19	109.06	121.47	138.20
pchoBqD	-100.27	123.32	51.30	66.80	80.04	91.28	108.78	121.08	137.93
pchoBqE	-97.84	124.39	50.90	66.43	79.71	91.00	108.59	120.96	137.86

pchoBqF	-97.84	124.39	50.90	66.43	79.71	91.00	108.59	120.96	137.86
pchoCqA	-93.39	124.57	49.93	65.62	79.02	90.41	108.13	120.59	137.63
pchoCqB	-96.29	124.48	49.51	65.87	79.72	91.37	109.25	121.59	138.26
pchoCqD	-97.39	122.16	50.95	66.79	80.30	91.76	109.50	121.84	138.40
pchoCqE	-97.76	124.76	50.53	66.35	79.80	91.17	108.78	121.08	137.92
pchoCqF	-97.76	124.76	50.53	66.35	79.80	91.17	108.78	121.08	137.92
pchoCqG	-97.76	124.76	50.53	66.35	79.80	91.17	108.78	121.08	137.92
pchoEqA	-93.39	124.57	49.93	65.62	79.02	90.41	108.13	120.59	137.63
pchoEqB	-97.49	124.58	49.82	65.78	79.38	90.91	108.77	121.21	137.99
pchoEqC	-97.49	124.58	49.82	65.78	79.38	90.91	108.77	121.21	137.99
pchoEqD	-97.39	122.16	50.95	66.79	80.30	91.76	109.50	121.84	138.40
pchoEqF	-96.29	124.48	49.51	65.87	79.72	91.37	109.25	121.59	138.26
pchoEqG	-97.49	124.58	49.82	65.78	79.38	90.91	108.77	121.21	137.99
pchoEqH	-97.49	124.58	49.82	65.78	79.38	90.91	108.77	121.21	137.99
pchoEqI	-97.76	124.76	50.53	66.35	79.80	91.17	108.78	121.08	137.92
pchoFqA	-92.76	127.21	53.50	68.00	80.30	90.70	106.91	118.53	135.70
pchoFqB	-97.13	127.40	54.19	68.76	81.06	91.43	107.53	119.05	136.10
pchoFqC	-98.23	124.57	51.61	67.00	80.12	91.26	108.60	120.84	137.80
pchoFqD	-100.66	123.50	51.88	67.33	80.46	91.57	108.80	120.92	137.73
pchoFqE	-96.76	124.29	50.57	66.51	80.03	91.45	109.07	121.35	138.13
pchoFqG	-96.76	124.29	50.57	66.51	80.03	91.45	109.07	121.35	138.13
pchoFqH	-98.23	124.57	51.61	67.00	80.12	91.26	108.60	120.84	137.80
pchoFqI	-98.23	124.57	51.61	67.00	80.12	91.26	108.60	120.84	137.80
pchoGqC	-98.23	124.57	51.61	67.00	80.12	91.26	108.60	120.84	137.80
pchoGqD	-100.66	123.50	51.88	67.33	80.46	91.57	108.80	120.92	137.73
pchoGqE	-98.23	124.57	51.61	67.00	80.12	91.26	108.60	120.84	137.80
pchoGqF	-96.76	124.29	50.57	66.51	80.03	91.45	109.07	121.35	138.13
pchoAojB	-52.52	114.25	44.73	59.84	72.70	83.59	100.42	112.13	128.11
pchoAojC	-53.99	114.53	45.60	60.28	72.81	83.45	99.98	111.57	127.46
pchoAojD	-56.42	113.46	46.04	60.65	73.13	83.72	100.18	111.67	127.29
pchoBojA	-55.59	115.24	45.49	59.61	71.83	82.34	98.95	110.76	126.87
pchoBojC	-59.97	115.35	44.07	59.20	72.11	83.07	100.08	111.97	128.18
pchoBojD	-63.88	114.56	45.31	59.99	72.54	83.21	99.83	111.49	127.45
pchoBojE	-61.44	115.63	44.92	59.63	72.21	82.93	99.64	111.41	127.63
pchoCojA	-56.99	115.81	43.99	58.81	71.50	82.31	99.16	111.03	127.32
pchoCojB	-59.89	115.72	43.75	59.13	72.19	83.22	100.25	112.10	128.28
pchoCojD	-60.99	113.40	44.98	59.98	72.79	83.67	100.52	112.23	127.92
pchoCojE	-61.36	116.00	44.78	59.61	72.28	83.04	99.79	111.59	127.94
pchoCojF	-61.36	116.00	44.78	59.61	72.28	83.04	99.79	111.59	127.94
pchoEojA	-56.99	115.81	43.99	58.81	71.50	82.31	99.16	111.03	127.32
pchoEojB	-61.36	116.00	44.78	59.61	72.28	83.04	99.79	111.59	127.94
pchoEojC	-61.36	116.00	44.78	59.61	72.28	83.04	99.79	111.59	127.94
pchoEojD	-60.99	113.40	44.98	59.98	72.79	83.67	100.52	112.23	127.92
pchoEojF	-59.89	115.72	43.75	59.13	72.19	83.22	100.25	112.10	128.28
pchoEojG	-61.36	116.00	44.78	59.61	72.28	83.04	99.79	111.59	127.94
pchoEojH	-61.36	116.00	44.78	59.61	72.28	83.04	99.79	111.59	127.94
pchoEojI	-61.36	116.00	44.78	59.61	72.28	83.04	99.79	111.59	127.94
pchoFojA	-56.36	118.45	47.53	61.17	72.78	82.62	97.96	108.91	124.92
pchoFojB	-60.73	118.64	48.17	61.94	73.57	83.38	98.59	109.48	125.74
pchoFojC	-61.83	115.81	45.51	60.16	72.65	83.25	99.71	111.24	127.11
pchoFojD	-64.27	114.74	46.01	60.55	72.96	83.49	99.86	111.36	127.22
pchoFojE	-60.36	115.53	44.59	59.71	72.55	83.38	100.12	111.80	127.88
pchoFojG	-60.36	115.53	44.59	59.71	72.55	83.38	100.12	111.80	127.88
pchoFojH	-61.83	115.81	45.51	60.16	72.65	83.25	99.71	111.24	127.11
pchoFojI	-61.83	115.81	45.51	60.16	72.65	83.25	99.71	111.24	127.11
pchoGojD	-64.27	114.74	46.01	60.55	72.96	83.49	99.86	111.36	127.22
pchoGojE	-61.83	115.81	45.51	60.16	72.65	83.25	99.71	111.24	127.11
pchoGojF	-60.36	115.53	44.59	59.71	72.55	83.38	100.12	111.80	127.88
ApchohB	-37.78	113.93	44.44	59.62	72.63	83.72	101.05	113.34	130.56
BpchohA	-36.06	115.57	42.82	57.90	70.91	82.07	99.66	112.16	129.41
BpchohC	-40.43	115.76	43.56	58.62	71.61	82.75	100.29	112.74	129.97
CpchohB	-40.43	115.76	43.56	58.62	71.61	82.75	100.29	112.74	129.97
CpchohD	-42.86	114.69	43.99	59.00	71.96	83.07	100.51	112.82	129.60
DpchohC	-42.58	114.41	44.87	59.72	72.52	83.49	100.76	113.08	130.41
DpchohE	-42.58	114.41	44.87	59.72	72.52	83.49	100.76	113.08	130.41
EpchohD	-42.86	114.69	43.99	59.00	71.96	83.07	100.51	112.82	129.60
EpchohF	-40.43	115.76	43.56	58.62	71.61	82.75	100.29	112.74	129.97
FpchohE	-40.43	115.76	43.56	58.62	71.61	82.75	100.29	112.74	129.97
FpchohG	-40.43	115.76	43.56	58.62	71.61	82.75	100.29	112.74	129.97
GpchohF	-40.43	115.76	43.56	58.62	71.61	82.75	100.29	112.74	129.97
pcho-AB	-43.16	101.56	41.46	56.99	70.23	81.45	98.84	111.01	127.80
pcho-BC	-47.53	101.75	41.95	57.69	71.02	82.25	99.51	111.50	128.05
pcho-CD	-49.96	100.68	42.47	58.10	71.34	82.49	99.67	111.63	128.19
pcho-DE	-49.96	100.68	42.45	58.08	71.33	82.50	99.69	111.61	127.93
pcho-EF	-47.53	101.75	41.93	57.68	71.02	82.25	99.52	111.48	127.80
pcho-FG	-47.53	101.75	41.93	57.68	71.02	82.25	99.52	111.48	127.80
pcho-AC	-44.01	97.16	39.56	55.70	69.41	81.00	98.88	111.32	128.42
pcho-AD	-66.79	94.09	38.70	55.19	69.19	80.99	99.17	111.77	128.99
pcho-AE	-69.90	65.65	36.55	53.46	67.67	79.53	97.56	109.89	126.92
pcho-AF	-64.26	84.96	37.64	54.50	68.93	81.20	100.26	113.53	131.06
pcho-BD	-50.81	96.28	40.57	56.81	70.53	82.05	99.72	111.94	128.80
pcho-BE	-68.73	95.35	38.88	55.56	69.66	81.51	99.66	112.15	129.07
pcho-BF	-74.87	88.40	37.72	54.78	69.20	81.32	99.84	112.53	129.50
pcho-BG	-68.63	85.15	38.18	55.22	69.73	82.00	100.94	113.99	131.02
pcho-CE	-48.38	97.35	40.05	56.40	70.21	81.82	99.57	111.79	128.41
pcho-CF	-68.73	95.35	38.85	55.54	69.65	81.52	99.67	112.13	128.81
pcho-CG	-74.87	88.40	37.69	54.76	69.20	81.33	99.86	112.51	129.22
pcho-DF	-50.81	96.28	40.53	56.78	70.52	82.07	99.75	111.90	128.27
pcho-DG	-71.16	94.28	39.35	55.93	69.97	81.77	99.85	112.24	128.65
pcho-EG	-48.38	97.35	40.02	56.38	70.21	81.82	99.58	111.77	128.14
pcho-EI	-48.38	97.35	40.02	56.38	70.21	81.82	99.58	111.77	128.14
pcho-FH	-48.38	97.35	40.02	56.38	70.21	81.82	99.58	111.77	128.14
pcho-EH	-58.15	103.40	40.33	56.10	69.21	80.07	96.54	108.04	125.13
ApchoB	-30.93	107.28	42.54	56.87	69.14	79.58	95.86	107.28	122.86
BpchoA	-28.08	105.63	43.59	57.06	68.73	78.80	94.76	106.20	122.15
ApchoC	-24.15	111.42	41.18	55.30	67.46	77.88	94.28	105.93	122.01
CpchoA	-19.43	111.78	41.28	55.09	67.06	77.36	93.68	105.32	121.20
DpchoA	-21.38	112.58	41.94	55.02	66.51	76.55	92.75	104.59	121.06
ApchoE	-23.05	114.25	43.81	57.07	68.39	78.04	93.20	104.14	120.34
EpchoA	-19.43	111.78	41.28	55.09	67.06	77.36	93.68	105.32	121.20
ApchoF	-23.52	114.06	44.68	57.65	68.75	78.20	93.07	103.81	119.70
FpchoA	-19.43	111.78	41.28	55.09	67.06	77.36	93.68	105.32	121.20
BpchoC	-30.85	107.65	42.24	56.80	69.21	79.73	96.03	107.44	123.16
CpchoB	-30.93	107.28	42.54	56.87	69.14	79.58	95.86	107.28	122.86
DpchoB	-28.83	113.68	41.23	54.36	65.92	76.04	92.41	104.43	121.23
EpchoB	-26.88	112.88	40.53	54.42	66.47	76.86	93.34	105.12	121.19
BpchoE	-25.70	116.08	42.82	56.05	67.43	77.18	92.53	103.52	119.20
BpchoF	-26.17	115.89	43.92	56.71	67.76	77.26	92.33	103.23	118.99
FpchoB	-26.88	112.88	40.53	54.42	66.47	76.86	93.34	105.12	121.19
BpchoG	-26.17	115.89	43.92	56.71	67.76	77.26	92.33	103.23	118.99
GpchoB	-26.88	112.88	40.53	54.42	66.47	76.86	93.34	105.12	121.19
DpchoC	-30.85	107.65	42.24	56.80	69.21	79.73	96.03	107.44	123.16
CpchoE	-25.70	116.08	42.82	56.05	67.43	77.18	92.53	103.52	119.20
EpchoC	-26.80	113.25	40.31	54.31	66.48	76.96	93.54	105.27	121.03

CpchoF	-26.17	115.89	43.92	56.71	67.76	77.26	92.33	103.23	118.99
FpchoC	-26.80	113.25	40.31	54.31	66.48	76.96	93.54	105.27	121.03
CpchoG	-26.17	115.89	43.92	56.71	67.76	77.26	92.33	103.23	118.99
GpchoC	-26.80	113.25	40.31	54.31	66.48	76.96	93.54	105.27	121.03
DpchoE	-29.75	110.48	44.92	58.58	70.13	79.87	94.95	105.66	121.34
DpchoF	-28.12	116.69	44.61	56.64	67.20	76.43	91.40	102.53	118.97
DpchoG	-28.12	116.69	44.61	56.64	67.20	76.43	91.40	102.53	118.97
EpchoF	-30.22	110.29	45.78	59.16	70.49	80.04	94.83	105.33	120.70
FpchoE	-29.75	110.48	44.92	58.58	70.13	79.87	94.95	105.66	121.34
EpchoG	-26.17	115.89	43.92	56.71	67.76	77.26	92.33	103.23	118.99
GpchoE	-25.70	116.08	42.82	56.05	67.43	77.18	92.53	103.52	119.20
EpchoH	-26.17	115.89	43.92	56.71	67.76	77.26	92.33	103.23	118.99
HpchoE	-25.70	116.08	42.82	56.05	67.43	77.18	92.53	103.52	119.20
IpchoE	-25.70	116.08	42.82	56.05	67.43	77.18	92.53	103.52	119.20
FpchoG	-30.22	110.29	45.78	59.16	70.49	80.04	94.83	105.33	120.70
GpchoF	-30.22	110.29	45.78	59.16	70.49	80.04	94.83	105.33	120.70
HpchoF	-26.17	115.89	43.92	56.71	67.76	77.26	92.33	103.23	118.99
pche1	-16.46	98.80	38.73	53.25	65.75	76.44	93.24	105.15	121.65
pche2	-19.15	100.15	38.47	52.84	65.26	75.92	92.75	104.75	121.41
pche3	-20.34	101.73	38.62	53.11	65.58	76.25	93.02	104.94	121.56
pche4	-19.24	104.56	41.23	54.87	66.51	76.41	91.95	103.14	119.65
pche5	-17.88	103.36	40.79	54.51	66.23	76.21	91.85	103.10	119.66
pche6	-18.13	103.36	40.71	54.44	66.18	76.17	91.85	103.12	119.69
Apche2	16.95	97.59	38.00	52.23	64.41	74.78	90.95	102.32	117.90
Dpche2	12.15	96.46	36.77	50.54	62.53	72.91	89.42	101.24	117.32
Cpche4	14.26	100.75	39.72	53.03	64.39	74.05	89.19	100.04	115.74
Dpche5	13.42	99.67	38.59	52.05	63.56	73.36	88.71	99.72	115.65
Epche6	15.37	99.55	39.29	52.66	64.09	73.83	89.10	100.03	115.79
Fpche7	15.37	99.55	39.29	52.66	64.09	73.83	89.10	100.03	115.79
pche2ojA	-1.65	107.15	40.63	55.03	67.42	78.01	94.58	106.24	122.10
pche1ojC	-3.64	105.51	41.28	56.33	69.06	79.76	96.10	107.30	122.40
pche2ojD	-10.21	106.89	42.17	56.75	69.14	79.61	95.73	106.89	122.06
pche3ojB	-7.52	108.44	41.20	56.20	68.89	79.54	95.84	107.04	122.25
pche4ojC	-6.42	111.27	43.73	57.89	69.75	79.63	94.68	105.13	120.21
pche3ojE	-7.52	108.44	41.20	56.20	68.89	79.54	95.84	107.04	122.25
pche5ojD	-8.94	110.10	44.37	58.38	70.11	79.89	94.80	105.16	120.24
pche4ojF	-6.42	111.27	43.73	57.89	69.75	79.63	94.68	105.13	120.21
pche6ojE	-5.31	110.07	43.23	57.49	69.44	79.40	94.58	105.11	120.28
pche5ojG	-5.06	110.07	43.23	57.52	69.48	79.44	94.59	105.09	120.23
pche7ojF	-5.31	110.07	43.23	57.49	69.44	79.40	94.58	105.11	120.28
Ao2pchohB	-70.92	127.30	51.19	67.04	80.60	92.14	110.19	123.03	141.17
Bo2pchohA	-70.92	127.30	51.19	67.04	80.60	92.14	110.19	123.03	141.17
Bo2pchohC	-75.29	127.49	51.39	67.74	81.54	93.16	111.07	123.66	141.59
Co2pchohB	-75.29	127.49	51.39	67.74	81.54	93.16	111.07	123.66	141.59
Co2pchohD	-77.72	126.42	52.22	68.15	81.71	93.18	111.02	123.65	141.56
Do2pchohC	-77.72	126.42	52.22	68.15	81.71	93.18	111.02	123.65	141.56
Do2pchohE	-77.72	126.42	52.22	68.15	81.71	93.18	111.02	123.65	141.56
Eo2pchohD	-77.72	126.42	52.22	68.15	81.71	93.18	111.02	123.65	141.56
Eo2pchohF	-75.29	127.49	51.39	67.74	81.54	93.16	111.07	123.66	141.59
Fo2pchohE	-75.29	127.49	51.39	67.74	81.54	93.16	111.07	123.66	141.59
Fo2pchohG	-75.29	127.49	51.39	67.74	81.54	93.16	111.07	123.66	141.59
Go2pchohF	-75.29	127.49	51.39	67.74	81.54	93.16	111.07	123.66	141.59
pche1e3	5.51	93.16	37.91	51.37	62.85	72.59	87.71	98.33	113.09
pche2e4	2.26	118.77	39.47	52.74	64.03	73.62	88.55	99.13	113.92
pche3e5	18.05	96.72	37.55	50.56	61.48	70.61	84.55	94.27	108.52
pche4e6	5.81	100.94	39.80	52.82	63.69	72.74	86.54	96.23	110.62
pche5e7	8.63	101.64	38.97	51.75	62.55	71.63	85.69	95.65	110.29

pchoA	-65.79	107.34	42.94	57.39	69.89	80.64	97.61	109.67	126.22
pchoyA	-28.88	108.46	42.10	55.96	67.94	78.23	94.45	105.94	121.57
pchoB	-73.24	108.44	42.23	56.73	69.31	80.13	97.27	109.51	126.38
pchoC	-73.16	108.81	41.95	56.68	69.38	80.27	97.44	109.67	126.65
pchoE	-73.16	108.81	41.95	56.68	69.38	80.27	97.44	109.67	126.65
pchoF	-73.63	108.62	42.89	57.29	69.73	80.42	97.30	109.34	126.03
pchoG	-73.63	108.62	42.89	57.29	69.73	80.42	97.30	109.34	126.03
DpchqBqE	-47.54	139.39	59.54	75.58	89.11	100.42	117.52	128.91	144.28
FpchqBqE	-48.34	138.93	59.60	75.75	89.43	100.89	118.13	129.48	144.79
GpchqBqE	-47.54	138.93	59.60	75.75	89.43	100.89	118.13	129.48	144.79
IpchqBqE	-47.54	138.93	59.60	75.75	89.43	100.89	118.13	129.48	144.79
DpchqCqE	-47.00	139.39	59.54	75.59	89.11	100.42	117.52	128.91	144.26
FpchqCqE	-47.80	138.93	59.58	75.77	89.44	100.88	118.12	129.49	144.77
GpchqCqE	-47.00	138.93	59.58	75.77	89.44	100.88	118.12	129.49	144.77
HpchqCqE	-47.00	138.93	59.58	75.77	89.44	100.88	118.12	129.49	144.77
IpchqCqE	-47.00	138.93	59.58	75.77	89.44	100.88	118.12	129.49	144.77
DpchqCqF	-51.61	137.66	58.18	74.82	88.86	100.66	118.73	131.19	148.06
EpchqCqF	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
GpchqCqF	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
HpchqCqF	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
IpchqCqF	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
ApchqDqF	-49.24	136.11	58.24	75.10	89.28	101.13	119.18	131.57	148.32
BpchqDqF	-51.89	137.94	57.44	74.14	88.27	100.16	118.40	130.99	147.95
CpchqDqF	-51.89	137.94	57.44	74.14	88.27	100.16	118.40	130.99	147.95
GpchqDqF	-51.89	137.94	57.44	74.14	88.27	100.16	118.40	130.99	147.95
HpchqDqF	-51.89	137.94	57.44	74.14	88.27	100.16	118.40	130.99	147.95
BpchqEqG	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
CpchqEqG	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
DpchqEqG	-51.61	137.66	58.18	74.82	88.86	100.66	118.73	131.19	148.06
FpchqEqG	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
HpchqEqG	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
IpchqEqG	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
BpchqEqH	-3.11	142.07	55.22	71.41	85.12	96.66	114.37	126.62	143.54
CpchqEqH	-3.11	142.07	55.22	71.41	85.12	96.66	114.37	126.62	143.54
DpchqEqH	-51.61	137.66	58.18	74.82	88.86	100.66	118.73	131.19	148.06
FpchqEqH	-3.11	142.07	55.22	71.41	85.12	96.66	114.37	126.62	143.54
GpchqEqH	-3.11	142.07	55.22	71.41	85.12	96.66	114.37	126.62	143.54
IpchqEqH	-3.11	142.07	55.22	71.41	85.12	96.66	114.37	126.62	143.54
BpchqEqI	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
CpchqEqI	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
GpchqEqI	-49.46	139.01	57.03	73.77	87.94	99.88	118.21	130.87	147.87
CpchqFqH	-3.11	142.07	55.22	71.41	85.12	96.66	114.37	126.62	143.54
DpchqFqH	-51.41	138.43	57.68	73.69	87.42	99.12	117.36	130.16	147.47
EpchqFqH	-3.11	142.07	55.22	71.41	85.12	96.66	114.37	126.62	143.54
Dc6e5oA	4.36	95.50	31.45	38.91	45.32	50.81	59.50	65.80	75.06
Fc9oAoG	-58.79	136.23	54.04	65.84	75.94	84.55	98.13	108.01	122.80
Fc9oAoH	-54.35	141.65	51.49	62.81	72.77	81.48	95.60	106.02	121.17
MeDc8oCoIr	-54.20	139.90	50.84	63.05	73.55	82.55	96.82	107.24	122.73
MeDc8oBoIr	-53.03	136.00	50.03	62.81	73.48	82.41	96.30	106.69	128.90
MeEc8oAoFr	-53.86	139.69	51.69	63.64	73.91	82.72	96.69	106.92	122.27
EtDc7oEoIr	-53.86	139.69	51.69	63.64	73.91	82.72	96.69	106.92	122.27
Fc9oAoE	-58.79	136.23	54.03	65.83	75.93	84.55	98.14	108.00	122.61
MeEc8oDoIr	-53.59	139.51	51.10	63.11	73.48	82.42	96.65	107.08	122.53
c9oyAoF	-64.19	138.51	52.86	64.26	74.15	82.69	96.38	106.48	121.58
EtDc7oAoCr	-52.68	140.11	49.62	62.29	73.15	82.40	96.97	107.48	122.90
EtDc7oAoHr	-60.17	135.74	52.16	64.61	75.23	84.26	98.41	108.60	123.69
MeEc8oAoDr	-53.86	139.69	51.69	63.64	73.91	82.72	96.69	106.92	122.27

EtDc7oCoIr	-53.86	139.69	51.69	63.64	73.91	82.72	96.69	106.92	122.27
Ac9oBoF	-66.25	137.33	53.28	65.17	75.35	84.05	97.81	107.84	122.82
Ac9oDoF	-58.75	141.70	50.93	62.92	73.25	82.12	96.28	106.73	122.51
Fc9oAoD	-54.74	141.83	52.21	63.39	73.20	81.77	95.67	106.00	121.24
MeEc8oCoIr	-53.32	136.10	50.54	63.37	73.96	82.72	96.24	106.55	132.58
MeEc8oAoCr	-52.66	139.92	50.64	62.94	73.49	82.52	96.79	107.17	122.57
EtDc7oBoIr	-60.64	135.55	53.05	65.20	75.59	84.42	98.29	108.27	122.92
Ac9oCoF	-59.93	141.28	52.91	64.23	74.02	82.49	96.09	106.21	121.58
MeEc8oBoIr	-60.17	135.74	52.16	64.61	75.23	84.26	98.41	108.60	123.69
Fc9oAoC	-53.07	142.25	49.98	62.00	72.45	81.48	95.91	106.39	121.45
c9oAoGqjF	-90.03	150.19	58.63	72.34	83.66	92.96	107.02	117.37	144.53
Hc9oAoGqF	-84.93	152.66	60.23	73.54	84.53	93.58	107.28	117.50	144.53
c9oAoGqFqj	-113.05	169.65	66.06	81.02	93.23	103.09	117.50	127.66	155.90
c9oAoGoFqH	-146.46	161.51	61.36	74.92	86.02	95.04	108.39	118.14	146.34
c7oyAoBoG	-69.11	106.74	40.78	49.57	57.05	63.35	73.03	79.86	93.15
c6oyAoF	-44.54	109.36	35.76	43.05	49.22	54.44	62.74	69.22	85.00
c5oAqjE	-39.88	107.85	35.85	43.65	50.18	55.61	63.92	69.97	83.48
Cc5oAqE	-28.38	114.57	37.50	44.86	50.81	55.67	63.18	68.90	82.08
Bc5oAqE	-34.79	110.29	37.52	45.06	51.23	56.32	64.14	69.99	83.28
c5oAqEqjC	-64.39	126.14	44.09	52.79	59.86	65.57	73.91	79.75	95.36
c5oAqEqjB	-46.70	125.94	43.27	52.35	59.75	65.73	74.39	80.27	94.82
c5oAoEqC	-99.40	116.81	39.52	46.90	52.98	57.96	65.41	70.92	86.89
c5oAoEqB	-97.91	117.99	38.69	46.47	52.88	58.11	65.88	71.46	86.47
Ac7oBoG	-45.73	115.49	41.28	50.56	58.37	64.94	75.24	83.07	100.56
c7oBoGqjA	-75.91	132.30	48.29	58.19	66.42	73.26	83.76	91.66	111.94
Cc7oBoGqA	-70.81	134.36	50.01	59.61	67.49	73.98	84.00	91.69	111.75
Dc7oBoGqA	-64.41	139.01	49.95	59.39	67.05	73.33	83.02	90.60	110.57
c7oBoGqAqj	-98.93	151.75	55.71	66.89	76.00	83.38	94.23	101.97	123.25
c7oBoGqAqj	-100.41	151.95	56.53	67.32	76.11	83.22	93.75	101.44	123.76
c7oAoBoGqC	-127.43	129.31	49.96	60.37	69.01	76.09	86.50	93.50	108.36
c7oAoBoGqD	-128.92	129.51	50.78	60.80	69.11	75.93	86.02	92.97	108.86
EtDc7oEoIq	-87.02	150.31	56.48	70.36	81.86	91.34	105.72	116.32	143.61
CEtDc7oEoI	-75.52	157.03	58.14	71.56	82.48	91.41	104.98	115.26	142.25
DEtDc7oEoI	-85.02	151.49	58.15	71.61	82.60	91.60	105.35	115.77	142.95
EtDc7oEoIq	-111.53	169.97	64.73	79.48	91.53	101.31	115.71	126.09	155.48
EtDc7oEoIq	-111.23	166.42	67.44	81.16	92.77	102.58	117.84	128.73	144.58
EtDc7oAoEo	-146.54	160.63	60.15	73.61	84.66	93.69	107.20	117.28	146.72
EtDc7oAoEo	-110.17	155.33	60.81	72.86	83.08	91.75	105.34	115.22	130.47
Cc6oAoD	-47.08	104.78	36.53	44.17	50.41	55.54	63.56	70.06	88.97
MeCc6oAoDo	-112.52	123.12	42.03	51.08	58.84	65.47	75.96	83.60	94.90
MeCc6oyAoD	-75.62	124.24	41.18	49.64	56.88	63.06	72.80	79.87	90.24
MeCc6oAoDo	-75.62	124.24	41.18	49.64	56.88	63.06	72.80	79.87	90.24
c6oAoCoF	-109.28	115.85	35.30	43.33	49.95	55.44	64.07	70.71	81.85
c6oyAoCoF	-73.97	117.32	34.32	41.67	47.62	52.54	60.33	66.43	75.85
c6oAoCoyF	-73.97	117.32	34.32	41.67	47.62	52.54	60.33	66.43	75.85
Ec5oAoD	-35.84	96.76	30.34	36.65	41.89	46.25	53.09	58.40	71.22
Ec5oAoC	-35.62	101.59	28.47	35.24	40.69	45.12	51.98	57.50	73.46
MeBc5oAoCr	-39.41	111.64	34.27	42.10	48.81	54.55	63.61	70.19	79.92
c9oAoCqjF	-93.61	152.14	56.88	70.83	82.39	91.92	106.40	117.12	144.94
Dc9oAoCqF	-88.51	154.27	58.60	72.26	83.46	92.65	106.63	117.15	144.77
c9oAoCqFqj	-116.63	170.21	64.30	79.53	91.97	102.05	116.87	127.42	156.23
c9oAoCoFqD	-154.57	162.58	58.98	72.80	84.16	93.44	107.35	117.82	148.70
c6oAoC	-89.37	108.85	34.01	42.71	50.07	56.26	65.97	73.48	92.57
c6oyAoC	-54.06	110.32	33.04	41.04	47.74	53.36	62.23	69.22	87.87
MeEc8oAoCq	-89.62	151.35	56.26	70.07	81.61	91.23	105.97	116.76	141.61
DMeEc8oAoC	-84.52	153.50	57.98	71.49	82.68	91.96	106.20	116.79	141.42
GMeEc8oAoC	-78.12	158.07	57.82	71.06	82.06	91.19	105.27	115.81	140.42

MeEc8oAoCq	-112.64	170.80	63.69	78.76	91.18	101.35	116.45	127.06	152.91
MeEc8oAoCq	-114.67	171.00	64.52	79.18	91.28	101.20	115.97	126.52	153.39
MeEc8oAoCo	-147.14	162.17	56.76	71.23	83.18	92.97	107.55	118.09	146.22
MeEc8oAoCo	-149.17	162.37	57.58	71.66	83.28	92.81	107.07	117.56	146.65
MeBc5oAoF	-80.58	107.75	34.99	43.54	50.89	57.18	67.10	74.27	84.71
MeBc5oyAoF	-43.67	108.87	34.18	42.15	49.01	54.88	64.14	70.77	80.21
c9oDoFqjA	-96.54	152.47	56.14	69.98	81.45	90.93	105.38	116.32	146.21
Cc9oDoFqA	-91.44	154.60	57.85	71.42	82.53	91.65	105.61	116.36	146.04
c9oDoFqAqj	-119.56	171.92	63.56	78.68	91.03	101.05	115.86	126.63	157.56
c9oAoDoFqC	-154.57	162.58	58.98	72.80	84.16	93.44	107.35	117.82	148.70
EtDc7oArI	-26.49	129.18	51.75	64.50	75.30	84.47	98.94	109.69	129.22
EtDc7oAqjI	-60.19	143.39	57.70	71.48	83.20	93.09	108.43	119.45	140.32
DEtDc7oAqI	-51.79	149.20	59.30	72.53	83.51	92.69	107.08	117.82	138.41
EtDc7oAqIq	-88.74	161.27	66.20	80.96	93.22	103.34	118.53	129.36	154.98
EtDc7oAoIq	-123.76	151.94	61.62	75.08	86.35	95.73	110.03	120.55	146.67
c7oAoD	-92.22	116.47	42.06	51.61	59.68	66.49	77.18	85.53	107.44
c7oyAoD	-56.92	117.95	41.08	49.94	57.36	63.59	73.44	81.27	102.70
EtDc7oIrA	-26.49	129.18	51.75	64.50	75.30	84.47	98.94	109.69	129.27
EtDc7oIqjA	-60.19	143.39	57.69	71.49	83.20	93.09	108.42	119.46	140.36
CEtDc7oIqA	-48.69	150.11	59.35	72.69	83.83	93.16	107.69	118.39	138.95
DEtDc7oIqA	-51.79	149.20	59.31	72.52	83.50	92.70	107.09	117.81	138.46
EtDc7oIqAq	-84.69	163.05	65.94	80.62	92.88	103.06	118.42	129.23	152.20
EtDc7oIqAq	-88.74	161.27	66.20	80.95	93.22	103.34	118.54	129.36	154.95
EtDc7oAoIq	-119.71	153.71	61.36	74.74	86.01	95.44	109.91	120.42	144.08
MeEc8oArI	-27.73	129.18	51.75	64.50	75.30	84.47	98.94	109.69	129.22
MeEc8oAqjI	-60.19	143.39	57.70	71.48	83.20	93.09	108.43	119.45	140.32
DMeEc8oAqI	-48.69	150.11	59.35	72.70	83.84	93.16	107.69	118.40	138.91
FMeEc8oAqI	-48.69	150.11	59.34	72.70	83.84	93.16	107.68	118.40	138.99
MeEc8oAqIq	-84.69	163.05	65.94	80.62	92.88	103.06	118.42	129.23	152.20
MeEc8oAqIq	-84.69	163.05	65.94	80.62	92.88	103.06	118.42	129.23	152.20
MeEc8oAoIq	-119.20	154.42	59.00	73.10	84.88	94.67	109.52	120.27	145.94
MeEc8oAoIq	-119.20	154.42	59.00	73.10	84.88	94.67	109.52	120.27	145.94
MeCc6oAoG	-84.80	116.06	39.83	50.05	58.71	66.02	77.38	85.81	104.79
MeCc6oyAoG	-49.49	117.53	38.85	48.37	56.39	63.12	73.64	81.55	99.88
MeCc6oAoyG	-50.19	117.53	38.85	48.37	56.39	63.12	73.64	81.55	99.88
Bc6oAoF	-39.64	105.89	36.64	44.24	50.51	55.72	63.93	70.36	86.02
MeEc8oIrA	-25.98	129.89	49.38	62.87	74.18	83.69	98.55	109.55	131.31
Fc9oA	-28.17	131.24	51.72	64.33	74.93	83.89	98.13	108.98	130.58
MeEc8oIqjA	-59.68	144.10	55.34	69.84	82.07	92.32	108.04	119.30	142.36
CMeEc8oIqA	-48.18	150.82	56.99	71.05	82.71	92.39	107.30	118.24	140.97
DMeEc8oIqA	-48.18	150.82	56.99	71.05	82.71	92.39	107.30	118.24	140.97
MeEc8oIqAq	-84.18	162.38	63.58	78.97	91.76	102.29	118.03	129.08	154.29
MeEc8oIqAq	-84.18	163.75	63.58	78.97	91.76	102.29	118.03	129.08	154.29
MeEc8oAoIq	-119.20	154.42	59.00	73.10	84.88	94.67	109.52	120.27	146.00
c9oAqjF	-64.18	144.18	58.31	72.25	83.98	93.79	108.86	119.82	143.89
Cc9oAqF	-52.68	150.90	59.96	73.46	84.61	93.85	108.12	118.76	142.50
Dc9oAqF	-52.68	150.90	59.96	73.46	84.61	93.85	108.12	118.76	142.50
Hc9oAqF	-52.68	150.90	59.87	73.25	84.43	93.75	108.15	118.86	142.70
c9oAqFqjC	-88.68	162.46	66.55	81.39	93.67	103.75	118.84	129.60	155.73
c9oAqFqjD	-88.68	162.46	66.55	81.39	93.67	103.75	118.84	129.60	155.73
c9oAqFqjH	-89.22	163.84	66.55	81.39	93.66	103.75	118.85	129.59	155.73
c9oAoFqC	-126.62	154.83	61.23	74.66	85.86	95.14	109.32	119.99	148.67
c9oAoFqD	-126.62	154.83	61.22	74.67	85.86	95.14	109.32	120.00	148.70
c9oAoFqH	-127.16	154.83	61.22	74.67	85.86	95.14	109.32	120.00	148.70
MeBc5oArF	-12.38	101.80	32.99	41.99	49.45	55.66	65.33	72.53	87.30
pchoBqjE	-61.85	121.05	50.55	65.54	78.37	89.25	105.91	117.14	131.17
CpchoBqE	-56.75	122.96	52.25	66.97	79.44	89.97	106.14	117.17	130.97

pchoBqEqjC	-84.87	139.12	57.96	74.25	87.96	99.37	116.38	127.45	142.58
pchoBoEqC	-121.81	133.08	52.84	67.57	79.92	90.23	105.97	116.94	132.61
pchoEqjB	-59.61	120.34	54.43	68.74	80.49	90.08	104.38	114.67	141.44
DpchoEqB	-54.51	125.07	55.59	69.26	80.49	89.69	103.51	113.62	140.30
pchoEqBqjD	-84.79	141.16	59.86	75.28	88.14	98.85	115.13	126.45	142.76
pchoBoEqD	-122.91	130.76	54.29	68.50	80.51	90.61	106.20	117.17	132.76
c7e6oA	-34.07	108.73	38.50	47.70	55.64	62.46	73.33	81.30	93.26
Ec7e6oA	-.57	104.92	36.95	45.88	53.56	60.15	70.57	78.16	89.40
c5e4oB	-30.43	91.21	25.78	32.45	38.20	43.13	50.97	56.71	65.24
Cc5e4oB	3.07	87.40	24.24	30.63	36.10	40.78	48.18	53.57	61.61
c7e6oAoE	-64.76	112.12	39.82	48.45	55.80	62.05	71.90	79.07	89.93
c7e6oyAoE	-27.85	113.24	38.99	47.01	53.84	59.64	68.74	75.34	85.27
Dc7oA	-17.87	117.04	39.75	48.91	57.00	64.10	75.65	84.20	96.67
c7e3oA	-35.61	110.68	36.90	46.50	54.76	61.85	73.09	81.31	93.59
c7e4oyA	.06	111.58	37.03	45.72	53.20	59.63	69.85	77.31	88.44
Cc5e4oA	9.29	86.08	25.98	31.94	37.07	41.47	48.45	53.50	60.91
c6e5oAo4	-59.82	102.70	34.39	41.50	47.54	52.68	60.80	66.76	75.96
c6e5oyAo4	-22.92	103.82	33.52	40.05	45.59	50.29	57.66	63.02	71.13
c5e4oAoC	-53.71	93.70	26.81	33.18	38.55	43.06	50.02	54.91	61.90
c5e4oyAoC	-16.81	94.82	25.96	31.74	36.59	40.65	46.86	51.18	57.25
c6alCco	-48.26	118.08	40.85	49.83	57.62	64.34	74.97	82.50	92.38
MeCc6oBoGr	-50.65	117.11	40.09	50.00	58.39	65.47	76.45	84.23	95.54
c7e6oAoD	-59.85	114.90	38.85	47.53	54.96	61.29	71.28	78.54	89.31
c7e6oyAoD	-22.95	116.02	38.03	46.10	53.00	58.87	68.12	74.82	84.73
c6e5oC	-35.75	100.81	31.96	39.98	46.85	52.73	62.07	68.94	79.42
Ac6e5oC	13.25	103.42	31.20	38.60	44.93	50.34	58.90	65.19	74.78
c9e5oAoD	-77.39	132.69	50.25	61.86	71.80	80.29	93.71	103.53	118.37
c9e5oyAoD	-40.48	133.81	49.41	60.43	69.84	77.87	90.55	99.80	113.73
c9e6oAoD	-72.49	135.47	49.18	60.92	70.97	79.55	93.11	102.94	117.48
c9e6oyAoD	-35.58	136.59	48.35	59.48	69.01	77.14	89.94	99.21	112.83
Ac8e5oC	.62	123.99	41.56	52.00	60.95	68.60	80.73	89.64	103.16
c6e5oAoC	-53.25	105.90	31.33	39.25	45.97	51.64	60.46	66.74	75.84
c6e5oyAoC	-16.35	107.02	30.49	37.81	44.01	49.23	57.30	63.01	71.20
Gic7al	-17.46	114.71	40.27	49.81	58.06	65.18	76.57	84.95	97.53
Ac6oC	-18.13	107.07	34.98	42.79	49.58	55.48	65.01	72.14	83.03
Gpc7al	-16.99	114.90	39.37	49.21	57.71	65.03	76.71	85.26	97.97
Bc5oA	-12.69	89.44	29.87	36.69	42.37	47.16	54.79	60.72	73.14
c7e6oAoC	-59.41	115.10	37.88	46.89	54.57	61.12	71.40	78.84	89.85
c7e6oyAoC	-22.51	116.22	37.07	45.46	52.61	58.69	68.23	75.12	85.26
Cc6oA	-12.94	107.62	34.23	41.99	48.88	54.96	64.92	72.32	83.01
Ipc9oAoB	-47.69	137.23	51.61	63.94	74.48	83.46	97.58	107.77	122.83
c2h4cohco	-20.80	90.63	24.46	29.15	33.17	36.62	42.04	45.93	51.45
Bc5oAoC	-44.22	97.48	28.45	35.26	40.78	45.30	52.34	58.01	74.13
Ac7oD	-23.06	116.49	40.46	49.76	57.83	64.82	76.09	84.47	97.23
Ac7oBoD	-54.71	118.91	40.33	49.93	58.09	65.02	75.88	83.71	95.30
Ec7e6oAoB	-20.94	108.60	37.33	46.08	53.49	59.75	69.45	76.31	86.22
chxoAoC	-78.24	94.42	28.87	37.13	44.26	50.37	60.04	67.01	77.04
BchxoAoC	-53.84	90.37	26.77	35.20	42.38	48.46	57.86	64.42	73.43
DchxoAoC	-35.44	93.26	29.22	37.27	44.09	49.82	58.65	64.81	73.48
c6oAoBoyF	-61.93	112.65	36.90	43.67	49.49	54.46	62.31	67.97	76.17
Ec5oAoB	-25.73	100.05	29.93	36.12	41.43	45.96	53.11	58.27	65.81
Fc6e1oCoE	-23.30	103.06	31.84	39.63	46.07	51.39	59.39	64.92	73.05
FpchqDqE	-51.89	137.94	57.44	74.14	88.27	100.16	118.40	130.99	147.95
pche5qD	-45.33	118.86	50.32	65.18	77.60	87.96	103.74	114.75	130.79
pche5ojD	-8.94	110.10	44.37	58.38	70.11	79.89	94.80	105.16	120.24
c9e1qAoF	-70.67	145.39	57.74	71.04	82.23	91.63	106.13	116.44	131.79
c9e1ojAoF	-58.00	135.45	51.10	63.48	74.00	82.92	96.88	106.98	122.24

Dc5oBohE	-45.65	101.86	31.71	38.84	45.00	50.31	58.84	65.21	75.37
c5oBqjDohE	-86.12	119.49	39.16	46.90	53.43	58.97	67.75	74.39	85.68
c4oAoC	-74.39	90.53	23.50	28.96	33.71	37.82	44.40	49.19	56.02
c4oyAoC	-37.48	91.65	22.65	27.51	31.75	35.41	41.24	45.47	51.38
Fc9e1qDqF	-32.46	160.79	65.72	79.65	91.41	101.31	116.64	127.55	143.58
Iic9e1qDqI	-32.76	159.03	65.40	79.10	90.73	100.58	115.97	127.03	143.32
c9e1oFqD	-76.38	144.80	58.13	71.25	82.37	91.77	106.48	117.14	133.25
c9e1oFojD	-39.98	136.04	52.11	64.43	74.87	83.71	97.54	107.57	122.92
EtDc7e1oIq	-73.21	141.95	58.34	71.66	82.92	92.40	107.14	117.72	133.52
EtDc7e1oIo	-36.81	133.19	52.50	64.86	75.39	84.32	98.24	108.09	121.87
c7e1oD	-41.17	110.23	37.46	46.95	55.09	62.06	73.14	81.28	93.68
Cc7e1oD	-17.27	106.18	35.32	45.02	53.23	60.16	70.94	78.68	90.33
Ipche4e6	32.23	99.18	43.09	54.98	64.92	73.13	85.24	93.12	106.23
Dpche5e7	35.02	98.75	45.85	57.21	66.75	74.73	86.82	95.04	108.18
Ipche5e7	35.02	98.29	45.90	57.38	67.08	75.20	87.43	95.62	108.68
Ic9oAoD	-53.31	137.30	52.91	65.01	75.04	83.38	96.41	106.57	132.42
Gc7oAoD	-43.42	118.58	41.98	51.10	58.55	64.69	74.26	81.89	103.02
Ic9oBoD	-62.55	138.16	49.68	62.44	73.08	82.00	95.97	106.69	131.74
Gc7oBoD	-52.66	119.44	38.75	48.51	56.59	63.31	73.82	82.01	102.33
Ac5oBoD	-45.08	97.62	27.10	34.08	39.94	44.87	52.65	58.53	70.48
MeDc6oBoGr	-43.14	117.28	39.10	48.89	56.99	63.72	74.16	82.01	99.60
Bc5oAoD	-41.84	95.61	30.51	36.63	41.68	45.88	52.55	57.86	70.75
MeEc8e1oIq	-69.88	145.10	55.13	69.03	80.72	90.46	105.24	115.71	138.25
MeEc8e1oIo	-32.32	132.45	48.82	62.28	73.55	82.94	97.25	107.49	129.16
MeEc6e1oGr	13.32	108.84	35.89	45.46	53.41	60.02	70.19	77.61	92.38
Fc9e1qEqH	-27.86	159.85	64.32	78.55	90.14	99.61	113.82	123.99	146.52
c9e1e5qH	-22.85	135.92	53.29	65.95	76.99	86.49	101.20	110.69	115.69
c9e1e5ojH	14.71	123.27	46.98	59.19	69.82	78.98	93.20	102.46	106.91
c7e1e6qC	-8.32	118.39	42.95	52.93	61.40	68.52	79.36	86.71	98.17
c7e1e6ojC	29.24	105.73	36.64	46.17	54.23	61.01	71.36	78.48	89.41
Cc7h11-16	46.43	97.32	33.64	42.12	49.47	55.80	65.85	73.10	84.27
c9e5oAqH	-71.31	145.25	57.51	70.79	82.05	91.59	106.47	117.20	133.22
c9e5oAojH	-34.91	136.49	51.56	64.00	74.56	83.52	97.52	107.64	122.91
HpchqBqE	-47.54	138.93	59.60	75.75	89.43	100.89	118.13	129.48	144.79
pche4qB	-43.84	120.51	49.56	64.54	77.06	87.50	103.46	114.69	131.32
pche4ojB	-7.45	111.75	43.98	57.78	69.42	79.20	94.31	105.02	120.81
mche1qC	-30.18	99.46	39.46	51.33	61.19	69.36	81.75	90.40	103.24
mche1ojC	6.21	90.70	33.50	44.86	54.38	62.31	74.29	82.41	93.42
MeBc4e1oEr	16.90	89.24	27.53	33.82	39.02	43.31	49.80	54.35	61.34
ch2ccho	36.58	69.21	16.71	19.66	22.11	24.13	27.21	29.40	32.85
pche5qB	-42.48	119.31	48.94	64.16	76.85	87.40	103.46	114.72	131.35
pche5ojB	-6.09	110.55	43.48	57.40	69.14	79.00	94.23	104.99	120.82
Amche3	40.89	84.81	33.15	43.58	52.25	59.44	70.34	77.85	89.32
Gc7e1e3	57.17	97.57	35.01	44.04	51.51	57.68	67.02	73.50	84.15
Fc9e1qAqH	-23.15	158.02	64.73	79.02	90.72	100.29	114.72	125.10	148.27
c7e1e6qA	-4.86	116.43	43.21	53.07	61.61	68.92	80.15	87.44	93.19
Bc7e6oA	5.27	105.90	38.24	47.13	54.58	60.86	70.72	78.14	92.88
Ic9oCoD	-54.73	137.18	52.57	65.11	75.42	83.90	96.94	106.88	132.58
Gc7oCoD	-44.84	118.46	41.64	51.19	58.93	65.22	74.79	82.21	103.25
Ac5oBoC	-37.26	96.65	30.00	36.75	42.26	46.78	53.62	58.71	71.44
MeDc6oCoGr	-44.34	121.06	39.79	49.08	57.06	63.88	74.68	82.54	94.19
MeEc8e1oIq	-69.34	145.10	55.13	69.03	80.72	90.46	105.24	115.71	138.25
MeEc8e1oIo	-31.78	132.45	48.82	62.28	73.55	82.94	97.25	107.49	129.16
Bc6e5oA	12.32	96.50	32.77	40.17	46.34	51.51	59.65	65.80	78.18
chxe1qC	-24.67	91.07	33.03	43.44	52.10	59.28	70.11	77.57	88.19
chxe1ojC	11.72	82.31	27.04	36.82	44.96	51.70	61.82	68.65	78.04
chchhco	38.78	69.25	17.46	20.60	23.11	25.11	27.96	29.80	32.54

c9e5oAqG	-70.91	145.37	57.22	70.43	81.61	90.98	105.39	115.74	137.49
c9e5oAojG	-33.35	132.72	50.91	63.67	74.43	83.47	97.40	107.50	128.46
c7e2oAoG	-58.90	114.78	37.27	46.59	54.80	62.00	73.77	82.69	97.33
c7e2oyAoG	-23.90	112.43	34.78	43.53	51.46	58.54	70.17	78.88	93.35
c7e2oAoyG	-23.60	116.26	36.30	44.90	52.47	59.11	70.03	78.42	92.44
c7e1oAoG	-58.33	112.71	41.09	49.90	57.38	63.71	73.55	80.56	90.83
c7e1oAoyG	-21.43	113.83	40.30	48.55	55.52	61.39	70.45	76.87	86.19
Fc6e1oA	14.77	101.23	33.46	40.96	47.25	52.52	60.63	66.39	75.11
Dc4e1oA	24.63	82.39	22.36	26.91	30.66	33.75	38.41	41.66	46.66
Fc9e1qEqG	-27.61	159.25	63.66	78.22	90.46	100.73	116.51	127.61	143.64
c9e1e6qE	-20.95	136.23	53.21	66.81	78.21	87.76	102.45	112.89	128.53
c9e1e6ojE	15.44	127.47	46.80	60.08	71.10	80.22	93.99	103.50	117.56
c9e1e5qG	-20.95	136.23	53.21	66.81	78.21	87.76	102.45	112.89	128.53
c9e1e5ojG	15.44	127.47	46.80	60.08	71.10	80.22	93.99	103.50	117.56
c7e2e6oA	-12.66	102.94	35.58	44.69	52.30	58.65	68.36	75.19	85.38
c7e2e6oyA	18.24	101.55	35.44	43.77	50.69	56.42	65.14	71.30	80.81
c5e2oA	-32.95	87.97	27.37	34.28	40.08	44.94	52.43	57.76	65.84
c5e2oyA	-2.05	86.58	27.24	33.37	38.47	42.72	49.21	53.85	61.10
EtDc7e1qEq	-27.20	156.92	64.35	79.36	91.83	102.15	117.76	128.57	144.24
EtDc7e1e8q	-21.20	134.48	53.44	67.12	78.59	88.17	102.87	113.26	128.71
EtDc7e1e8o	15.19	125.72	47.74	60.38	71.01	79.92	93.67	103.46	118.29
MeCc6oAoDr	-44.00	120.85	40.63	49.67	57.43	64.07	74.57	82.20	93.44
pche3qF	-43.84	120.51	49.56	64.54	77.06	87.50	103.46	114.69	131.32
pche3ojF	-7.45	111.75	43.85	57.75	69.44	79.24	94.32	104.99	120.83
MeEc8e5oAr	-14.12	127.06	48.90	60.92	71.15	79.83	93.46	103.33	118.25
EtDc7e4oIr	.18	132.83	47.42	59.42	69.70	78.48	92.35	102.45	117.61
MeEc7e6e8o	-15.81	110.73	42.92	53.11	61.62	68.72	79.65	87.51	99.79
MeEc7e6e8o	21.09	111.85	42.08	51.67	59.66	66.30	76.49	83.77	95.15
MeCc6e3oAr	-3.03	108.44	36.94	46.32	54.26	60.97	71.41	78.91	90.17
MeCc6e1e7r	57.13	98.87	35.46	44.23	51.57	57.70	67.14	73.89	84.46
MeCc5e4e5o	-4.72	92.11	30.91	38.51	44.77	49.91	57.65	63.08	71.60
MeCc5e4e5o	32.18	93.23	30.07	37.08	42.81	47.49	54.48	59.35	66.96
MeEc8e8oAq	-70.86	143.74	58.47	71.88	83.18	92.67	107.37	117.89	133.66
MeEc8e8oAo	-34.46	134.98	52.51	65.09	75.68	84.60	98.42	108.34	123.40
Ec6e5oA	27.76	101.12	32.64	39.50	45.46	50.62	58.91	65.03	74.15
MeBc6e7oAo	-61.13	110.14	40.70	49.73	57.29	63.60	73.27	80.07	90.19
MeBc6e7oAo	-24.23	111.26	39.87	48.29	55.32	61.18	70.09	76.33	85.58
MeBc6e7oyA	-30.23	108.75	40.52	48.80	55.69	61.40	70.07	76.16	85.38
MeBc5e6oAr	11.97	98.66	32.96	40.75	47.25	52.65	60.88	66.66	75.46
ic3h4hco	8.76	74.27	22.59	27.68	31.80	35.10	39.91	43.14	48.02
EtDc7e1oIq	-70.78	143.02	57.90	71.29	82.60	92.14	106.97	117.60	133.43
EtDc7e1oIo	-34.38	134.26	51.91	64.48	75.11	84.08	98.03	108.03	123.08
MeCc6e5oAo	-55.01	113.09	38.68	47.62	55.23	61.70	71.81	79.02	89.54
MeCc6e5oyA	-18.11	114.21	37.84	46.18	53.28	59.29	68.65	75.29	84.87
MeCc6e5oAo	-18.11	114.21	37.84	46.18	53.28	59.29	68.65	75.29	84.87
MeBc5e4oAr	18.09	101.61	31.08	38.69	45.19	50.72	59.41	65.68	74.94
Cc6e5oA	4.36	95.50	31.45	38.91	45.32	50.81	59.50	65.80	75.06
Dc7oAoC	-47.75	117.81	41.02	50.57	58.68	65.53	76.21	83.87	95.23
c3h7chco	-29.30	89.20	28.53	35.22	40.83	45.50	52.67	57.76	65.54
EtDc7e9oAq	-70.53	143.02	57.80	71.28	82.65	92.21	107.02	117.61	133.43
EtDc7e9oAo	-34.13	134.26	52.04	64.54	75.13	84.07	98.01	108.06	123.27
c9e5oAqC	-71.31	145.25	57.51	70.79	82.05	91.59	106.47	117.20	133.22
c9e5oAojC	-34.91	136.49	51.56	64.00	74.56	83.52	97.52	107.64	122.91
MeCc6e1oG	-35.79	108.05	37.72	47.16	55.30	62.31	73.47	81.63	93.75
MeCc6e1oyG	1.11	109.17	36.89	45.73	53.35	59.90	70.31	77.90	89.12
c7e3oyA	1.29	111.80	36.07	45.07	52.80	59.43	69.93	77.58	88.96
AmchqBqD	-39.38	117.27	47.19	61.14	72.80	82.48	97.05	106.86	119.71

mche1qD	-31.21	99.94	39.37	51.11	60.91	69.06	81.47	90.13	102.78
mche1ojD	5.18	91.18	33.49	44.35	53.42	60.98	72.50	80.56	92.50
MeEc6e5oAr	-1.49	106.49	38.53	47.51	55.13	61.58	71.63	78.89	89.83
MeCc6e7oAr	12.81	112.26	37.04	46.02	53.69	60.23	70.53	78.02	89.23
MeCc4e3oAr	9.60	87.87	27.10	33.40	38.71	43.15	49.85	54.32	59.81
c9e1oFqD	-76.38	144.80	58.13	71.25	82.37	91.77	106.48	117.14	133.25
c9e1oFojD	-39.98	136.04	52.11	64.43	74.87	83.71	97.54	107.57	122.92
pche6qD	-45.16	118.24	49.72	64.49	76.92	87.34	103.36	114.64	131.03
pche6ojD	-8.77	109.48	43.82	57.72	69.43	79.26	94.41	105.11	120.82
Ac9e2oF	-21.21	126.39	47.59	59.27	69.37	78.06	91.92	102.12	117.39
Ac9e3oF	-4.31	133.41	47.06	58.98	69.19	77.93	91.80	101.98	117.42
Ac7e1oD	18.42	111.62	37.29	46.15	53.71	60.16	70.33	77.78	89.17
Ic9e3oA	3.53	132.13	47.15	59.08	69.33	78.12	92.07	102.26	117.47
Gc7e3oA	13.39	113.29	36.13	45.12	52.85	59.46	69.94	77.57	88.96
Ic9e4oA	2.30	131.91	48.09	59.72	69.74	78.33	91.99	102.00	117.02
MeDc8e9oAr	1.72	130.88	49.01	60.62	70.58	79.09	92.58	102.45	117.36
MeDc6e7oAr	11.58	112.04	37.99	46.67	54.09	60.43	70.44	77.75	88.78
Dc5e4oA	32.69	91.70	27.17	32.53	37.22	41.28	47.85	52.72	59.98
EtDc7e9oAr	3.08	129.68	48.52	60.25	70.31	78.90	92.49	102.41	117.36
Gc7e4oA	12.16	113.07	37.09	45.77	53.25	59.66	69.85	77.30	88.42
Ec5e4oA	34.89	91.28	27.34	32.96	37.77	41.89	48.40	53.14	60.23
MeDc6e5oAr	12.94	110.84	37.50	46.30	53.82	60.24	70.35	77.71	88.79
Dc9e8oA	2.42	132.01	47.92	59.30	69.22	77.81	91.57	101.62	116.26
EtDc7e6oAr	2.83	129.68	48.45	60.21	70.28	78.89	92.50	102.39	117.20
Dc7e6oA	12.28	113.17	36.98	45.38	52.73	59.14	69.45	77.01	88.00
Gc7e1oE	7.09	112.62	37.66	46.21	53.56	59.86	69.88	77.24	88.35
Ic9e3oB	-8.82	130.45	47.35	59.31	69.59	78.41	92.41	102.64	117.91
Gc7e3oB	1.04	111.61	36.30	45.37	53.14	59.79	70.31	77.98	89.40
MeDc8e9oBr	-4.50	132.20	47.29	59.30	69.61	78.42	92.36	102.54	117.77
MeDc6e7oBr	5.36	113.36	36.28	45.36	53.13	59.76	70.23	77.85	89.25
Dc5e4oB	26.47	93.02	25.42	31.22	36.25	40.61	47.62	52.79	60.48
Ic9e4oB	-3.92	133.23	46.41	58.41	68.75	77.63	91.75	102.08	117.49
EtDc7e9oBr	-4.37	130.78	47.83	59.60	69.72	78.39	92.15	102.25	117.46
Gc7e4oB	5.94	114.39	35.39	44.46	52.27	58.97	69.62	77.40	88.97
Ec5e4oB	28.67	92.60	25.59	31.64	36.81	41.22	48.17	53.21	60.72
MeDc6e5oBr	5.49	111.94	36.81	45.65	53.23	59.72	70.02	77.56	88.93
Dc9e8oB	-5.03	133.11	47.15	58.63	68.64	77.33	91.27	101.47	116.30
EtDc7e6oBr	-4.62	130.78	47.74	59.55	69.69	78.38	92.16	102.23	117.33
Dc7e6oB	4.83	114.27	36.22	44.70	52.15	58.64	69.11	76.81	87.97
MeDc8e7oBr	-4.62	130.78	47.74	59.55	69.69	78.38	92.16	102.23	117.33
MeDc8e9oCr	-8.36	129.29	48.98	60.80	70.87	79.45	92.96	102.84	117.89
MeCc6e7oDr	1.50	110.45	37.97	46.84	54.38	60.78	70.82	78.15	89.37
Bc5e1oC	13.18	89.73	27.70	33.13	37.87	42.01	48.74	53.81	61.52
eche1oD	-37.75	98.36	36.32	47.96	57.81	66.13	79.06	88.30	102.00
c9e6oyA	-9.80	130.42	48.03	59.67	69.69	78.30	91.99	102.01	117.03
Ic9e3oE	-9.21	130.63	48.10	59.90	70.01	78.67	92.41	102.49	117.78
Hc8h15-3	26.40	117.82	41.11	52.14	61.64	69.80	82.80	92.33	106.76
Ac7e4oC	3.83	90.81	36.88	45.48	52.73	58.84	68.37	75.33	86.47
Ic9e4oC	-9.21	130.63	48.10	59.90	70.01	78.67	92.41	102.49	117.78
EtDc7e9oCr	-5.32	131.16	47.61	59.56	69.78	78.51	92.31	102.41	117.70
Gc7e4oC	.65	111.79	37.08	45.94	53.53	60.00	70.27	77.80	89.26
Ac5e1oC	22.88	90.41	29.83	42.84	52.75	60.29	70.58	76.98	90.22
MeCc6e1oDr	4.54	112.32	36.56	45.59	53.29	59.84	70.17	77.71	89.16
Ac9e6oB	-11.85	129.24	48.47	60.58	70.90	79.66	93.41	103.36	118.30
Gc7h13-3	31.33	108.40	35.65	45.17	53.38	60.45	71.71	80.00	92.56
Ac9e6oD	-4.31	133.41	47.06	58.98	69.19	77.93	91.80	101.98	117.42
Ac7e4oB	-.76	110.62	36.50	45.98	54.01	60.79	71.36	78.92	90.19

EtDc7e6oCr	-4.54	131.15	47.48	59.50	69.77	78.52	92.33	102.39	117.57
Dc9e8oC	-9.47	127.69	49.73	61.67	71.80	80.37	93.76	103.43	118.03
Dc7e1oE	.39	108.85	38.77	47.73	55.30	61.69	71.62	78.76	89.56
eche1oF	-37.19	98.16	37.17	48.54	58.18	66.31	78.95	87.95	101.20
Ac9e6oC	-5.54	133.19	48.00	59.61	69.58	78.12	91.69	101.65	116.73
MeDc8e7oCr	-4.54	131.15	47.48	59.50	69.77	78.52	92.33	102.39	117.57
MeEc8e9oDr	-8.36	129.29	48.98	60.80	70.87	79.45	92.96	102.84	117.89
MeCc6e7oBr	-4.81	106.50	38.37	47.81	55.72	62.36	72.57	79.82	90.69
mche1oD	-33.22	90.23	32.88	42.50	50.65	57.53	68.22	75.87	87.26
MeEc8e9oCr	-4.89	132.38	47.99	59.87	70.02	78.68	92.37	102.41	117.67
MeEc8e9oyA	-10.38	129.39	48.95	60.57	70.53	79.06	92.58	102.46	117.37
MeCc6e7oyA	.71	110.77	36.97	45.96	53.65	60.20	70.53	78.03	89.24
MeBc5e1rF	22.61	92.40	31.62	39.95	47.02	53.02	62.42	69.25	79.70
MeDc7e8rA	25.82	116.79	42.05	53.04	62.47	70.55	83.38	92.78	107.07
mche1oE	-34.45	90.01	33.92	43.17	51.04	57.71	68.14	75.61	86.69
MeEc8e9oBr	-5.73	131.98	48.31	59.97	69.99	78.58	92.25	102.28	117.46
Ac9e5oC	-4.31	133.41	47.06	58.98	69.19	77.93	91.80	101.98	117.42
MeEc6e5oBr	-8.94	107.59	37.86	46.87	54.54	61.05	71.29	78.74	90.06
Ac9e5oD	-9.21	130.63	48.10	59.90	70.01	78.67	92.41	102.49	117.78
Ac7e3oB	-5.66	107.84	37.47	46.91	54.88	61.60	72.03	79.49	90.60
EtDc7e1oCr	-8.21	128.59	47.22	59.74	70.34	79.29	93.25	103.28	118.31
Dc7e1oC	-3.78	106.70	38.89	48.03	55.71	62.18	72.21	79.46	90.67
EtDc7e9oyA	-9.02	128.19	48.46	60.20	70.26	78.87	92.49	102.42	117.37
EtCc6e1rH	27.18	115.59	41.58	52.67	62.20	70.36	83.29	92.76	107.10
MeEc8e1oDr	-3.31	131.37	46.44	58.82	69.38	78.35	92.44	102.63	117.80
MeEc8e1oyI	-8.80	128.38	47.56	59.58	69.88	78.70	92.62	102.73	117.73
c6e1e5oC	-9.27	94.38	29.08	36.66	43.02	48.34	56.57	62.45	71.40
Ec8h15-1	26.52	117.92	40.92	51.71	61.11	69.27	82.37	91.99	106.24
Ac9e5oB	-11.85	129.24	48.47	60.58	70.90	79.66	93.41	103.36	118.30
EtDc7e9oBr	-11.07	127.01	48.90	61.11	71.46	80.23	93.91	103.77	118.63
MeCc6e1rG	32.11	106.17	36.07	45.70	53.96	61.03	72.24	80.45	92.91
EtDc7e1oHr	-10.85	127.20	47.93	60.46	71.08	80.06	94.03	104.04	118.91
Fc9e1oE	-4.03	107.08	48.71	60.70	70.73	79.12	92.04	101.30	115.79
c7e1e6oC	-15.43	103.58	35.66	44.32	51.65	57.84	67.52	74.57	85.49
c9e5oyA	-9.80	130.42	48.03	59.67	69.69	78.30	91.99	102.01	117.03
EtDc7e9oCr	-4.71	130.77	47.83	59.60	69.72	78.39	92.15	102.25	117.46
Ac8h15-4	26.40	117.82	41.11	52.14	61.64	69.80	82.80	92.33	106.76
EtBc5e7oyA	.28	109.55	36.45	45.60	53.41	60.06	70.50	78.04	89.26
Fc9e1oC	-9.09	130.73	47.73	59.42	69.52	78.21	92.03	102.10	116.94
MeEc8e1oCr	-8.68	147.20	50.42	62.74	73.22	82.12	96.04	106.00	120.39
EtDc7e1oyI	-9.27	128.19	48.39	60.15	70.24	78.86	92.49	102.40	117.21
MeDc7e1rH	26.93	115.59	41.57	52.64	62.16	70.32	83.28	92.78	107.13
Fc9e1oD	-4.19	133.51	46.75	58.50	68.68	77.45	91.40	101.55	116.39
c7e1e6oD	-11.22	104.40	34.36	42.95	50.35	56.69	66.74	74.04	84.82
ch2cco	40.47	32.23	9.02	10.74	12.22	13.47	15.41	16.75	18.89
EtDc7e3oIr	.18	132.83	47.42	59.42	69.70	78.48	92.35	102.45	117.61
Etall	34.01	78.87	24.56	30.53	35.73	40.21	47.32	52.43	60.39
EpchqDqB	-51.89	137.94	57.44	74.14	88.27	100.16	118.40	130.99	147.95
Fc6e1e4	53.64	89.58	27.83	35.48	41.90	47.29	55.58	61.49	70.48
mche1qDqF	-56.15	113.75	48.50	60.95	71.25	79.75	92.50	101.23	113.71
mche1qDojF	-19.76	106.37	42.55	54.16	63.79	71.74	83.71	91.96	103.92
MeEc8e9oAq	-71.89	144.22	58.40	71.69	82.91	92.37	107.07	117.63	133.45
MeEc6e5oAq	-26.26	122.06	47.50	57.30	65.49	72.32	82.79	90.20	101.25
Dc4oAqC	-25.03	102.90	32.56	38.59	43.67	47.93	54.51	59.20	66.08
MeCc6e7oAq	-11.79	128.21	45.60	55.84	64.36	71.43	82.18	89.67	100.57
MeCc6e5e7o	-5.74	105.80	34.97	43.84	51.32	57.63	67.44	74.48	85.11
MeCc6e5e7o	31.16	106.92	34.14	42.40	49.37	55.22	64.28	70.75	80.47

MeBc5e1e4r	53.06	88.55	28.73	36.37	42.74	48.05	56.17	61.94	70.79
MeEc8e9oAo	-35.49	135.46	52.50	64.90	75.40	84.27	98.11	108.10	123.25
MeCc6e7oA	-36.19	109.65	37.81	47.40	55.61	62.62	73.69	81.76	93.88
Ic9e3qFqH	-27.73	159.15	64.00	78.88	91.27	101.56	117.20	128.10	143.97
c9e1e6qD	-21.98	136.71	53.08	66.62	77.99	87.52	102.22	112.69	128.38
c9e1e6ojD	14.41	127.95	47.27	59.84	70.44	79.36	93.18	103.05	117.96
c6e3oA	-30.68	101.26	31.39	39.53	46.52	52.52	62.03	68.97	79.34
c6e3oyA	6.22	102.38	30.56	38.09	44.56	50.10	58.87	65.24	74.70
BchxqAqC	-32.53	111.64	41.67	53.11	62.86	71.11	83.78	92.42	103.48
c9e6oAqE	-70.28	144.77	57.60	71.01	82.34	91.90	106.77	117.46	133.42
c9e6oAojE	-33.88	136.01	51.58	64.19	74.84	83.84	97.83	107.88	123.05
MeEc8e1oIq	-70.31	143.21	56.68	70.63	82.38	92.24	107.42	118.14	133.77
MeEc8e1oIo	-33.91	134.45	50.97	63.85	74.74	83.92	98.17	108.35	123.51
pche5qH	-42.48	119.31	48.94	64.16	76.85	87.40	103.46	114.72	131.35
pche5ojH	-6.09	110.55	43.48	57.40	69.14	79.00	94.23	104.99	120.82
EtDc7e1oIr	-15.36	124.61	47.46	59.37	69.63	78.43	92.40	102.62	117.88
pche4qH	-43.84	120.51	49.56	64.54	77.06	87.50	103.46	114.69	131.32
pche4ojH	-7.45	111.75	43.98	57.78	69.42	79.20	94.31	105.02	120.81
MeEc8e9oAr	-16.89	125.43	48.31	59.84	69.85	78.49	92.32	102.52	117.76
c9e6oAqD	-71.31	145.25	57.51	70.79	82.05	91.59	106.47	117.20	133.22
c9e6oAojD	-34.91	136.49	51.56	64.00	74.56	83.52	97.52	107.64	122.91
BchxqAqD	-32.53	111.64	41.67	53.11	62.86	71.11	83.78	92.42	103.48
chxe1qD	-25.75	92.43	32.96	42.94	51.33	58.35	69.09	76.54	87.02
chxe1ojD	10.69	82.79	27.14	36.44	44.26	50.81	60.86	67.87	77.87
ac3h4hco1	41.05	78.19	20.85	25.61	29.64	33.05	38.32	42.04	47.27
pche6qI	-42.48	119.31	48.94	64.16	76.85	87.40	103.46	114.72	131.35
pche6ojI	-6.09	110.55	43.48	57.40	69.14	79.00	94.23	104.99	120.82
MeEc8e1oIr	-12.20	123.45	46.86	59.19	69.77	78.80	93.03	103.32	118.54
pche5qI	-42.48	119.31	48.94	64.16	76.85	87.40	103.46	114.72	131.35
pche5ojI	-6.09	110.55	43.48	57.40	69.14	79.00	94.23	104.99	120.82
Fc9e4oA	-13.20	125.49	47.32	59.29	69.58	78.40	92.39	102.60	117.82
c7e4e6oA	-10.65	102.65	36.59	45.26	52.52	58.61	68.02	74.84	85.55
c7e4e6oyA	26.25	103.77	35.77	43.83	50.56	56.19	64.86	71.11	80.91
Ec6h9-13	46.95	84.75	27.96	35.82	42.36	47.79	56.08	61.95	71.04
Fc6h9-13	62.46	91.17	28.72	36.25	42.52	47.72	55.68	61.34	70.24
AchxqBqD	-32.53	111.64	41.67	53.11	62.86	71.11	83.78	92.42	103.48
c9e6oAqC	-71.31	145.25	57.51	70.79	82.05	91.59	106.47	117.20	133.22
c9e6oAojC	-34.91	136.49	51.56	64.00	74.56	83.52	97.52	107.64	122.91
c7e4oA	-36.84	110.46	37.86	47.15	55.16	62.05	73.01	81.04	93.08
c6e2e5oA	-7.43	93.54	30.07	37.69	44.02	49.26	57.23	62.82	71.25
c6e2e5oyA	23.47	92.15	29.88	36.77	42.42	47.07	54.05	58.92	66.43
Dc6e5oAoC	-10.95	104.74	31.68	39.39	45.78	51.07	59.03	64.52	72.43
Fc6e3oAoE	-18.67	103.31	32.37	39.86	46.11	51.31	59.20	64.68	72.58
c9oAoF	-101.10	137.39	53.69	65.69	76.11	85.11	99.56	110.23	126.20
MeEc8oAoI	-95.03	135.80	52.55	65.13	75.99	85.32	100.15	110.99	127.07
MeEc8oyAoI	-58.12	136.92	51.71	63.70	74.03	82.90	96.99	107.26	122.43
MeEc8oAoyI	-58.12	136.92	51.71	63.70	74.03	82.90	96.99	107.26	122.43
EtDc7oAoI	-95.50	135.61	53.45	65.73	76.34	85.49	100.05	110.68	126.32
EtDc7oAoyI	-58.59	136.73	52.65	64.31	74.38	83.05	96.85	106.93	121.81
EtDc7oyAoI	-58.59	136.73	52.65	64.31	74.38	83.05	96.85	106.93	121.81
c9e8oD	-52.26	125.87	49.12	61.47	72.01	80.97	95.05	105.65	129.30
Hc8oD	-27.99	125.91	45.97	56.74	66.07	74.15	87.15	96.83	111.60
MeDc7oHrA	-21.92	124.32	44.88	56.19	65.96	74.37	87.78	97.61	112.23
Ec8oA	-22.80	126.46	45.22	55.87	65.25	73.44	86.72	96.52	110.82
EtCc6oArH	-22.39	124.13	45.78	56.79	66.31	74.52	87.64	97.30	111.82
MeDc7oArH	-22.39	124.13	45.78	56.79	66.31	74.52	87.64	97.30	111.82
vinacrol	-6.76	80.16	25.95	32.36	37.53	41.66	47.51	51.10	55.35

Mec8oor	-53.86	139.69	51.69	63.64	73.91	82.72	96.69	106.92	122.27
Mec8ooqj	-87.02	150.31	56.49	70.35	81.85	91.34	105.72	116.31	143.67
Mec8ooqr	-81.92	152.78	58.08	71.57	82.74	91.95	105.98	116.46	143.67
Mec8ooqqj	-110.04	169.77	63.90	79.06	91.43	101.46	116.19	126.63	154.88
Mec8oooq	-149.95	162.12	60.81	74.50	85.97	95.54	110.16	120.38	135.03
c5oAoE	-74.90	97.16	31.27	37.77	43.30	47.99	55.41	61.15	75.16
c5oyAoE	-39.59	100.00	30.29	36.10	40.98	45.09	51.67	56.89	70.30
bmepral	-51.44	83.50	23.97	29.51	34.74	39.39	46.58	51.84	59.47
bme1bu	-8.55	81.03	26.68	33.54	39.59	44.83	53.04	59.22	68.85
bme2bu	-10.15	80.74	25.47	32.15	38.21	43.53	51.96	58.37	68.42
bddm1pe	-19.90	96.48	37.01	47.26	56.11	63.69	75.59	84.09	97.73
bddm2pe	-22.37	96.27	35.83	46.00	54.85	62.43	74.26	83.13	96.92
dddm1pe	-21.11	90.66	35.67	45.92	54.81	62.47	74.55	83.15	95.92
dddm2pe	-17.97	91.77	35.75	46.52	55.82	63.67	75.60	84.28	97.12
bddmpe2	-5.07	103.66	38.85	49.32	58.42	66.21	78.35	87.46	101.62
bbdtmpe1	-5.48	106.02	44.49	57.36	68.25	77.33	91.05	101.00	115.75
bddm3pe2	2.93	92.97	36.93	45.87	53.93	60.97	72.04	80.36	93.18
bmepryl	-15.65	81.05	21.16	26.91	31.77	35.88	42.35	47.23	57.62
bme2b1	24.05	78.24	26.03	32.53	38.14	42.93	50.40	56.02	64.85
cme2b1	24.05	77.84	26.01	32.47	38.05	42.81	50.28	55.92	64.83
nec5h11	9.95	78.32	28.31	36.50	43.43	49.19	57.81	64.01	73.05
dddmpe2	-4.37	99.35	38.90	49.91	59.33	67.26	79.34	88.19	101.47
bbdtmpe3	-10.48	106.12	44.18	56.86	67.65	76.71	90.52	100.64	115.85
dddm2pe1	9.79	89.87	34.93	45.09	53.73	61.07	72.47	80.50	92.34
bddtmpe2	-12.88	106.62	44.85	57.33	68.03	77.06	90.82	100.90	116.01
bddtmpe1	-6.48	105.22	44.49	57.36	68.25	77.33	91.05	101.00	115.75
bddm1pe3	9.53	96.07	36.59	46.72	55.21	62.29	73.16	81.22	93.65
bddm2pe3	34.59	98.59	37.13	46.70	54.87	61.85	73.00	81.23	94.41
dddm2pe2	35.19	92.58	34.69	44.12	52.28	59.31	70.49	78.60	90.65
dm2my1pe	15.13	95.57	36.60	46.82	55.33	62.40	73.26	81.30	93.76
dddm1pe3	11.23	91.17	36.77	47.28	56.10	63.41	74.36	82.24	93.78
bddm2pe1	8.09	96.52	37.06	47.11	55.75	63.14	74.78	83.11	96.24
dddm1pe2	37.20	93.40	36.01	46.06	54.59	61.79	72.88	80.61	92.68
*oc7h14	.00	36.98	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97	4.97
bme2pe4	13.84	88.20	31.40	39.29	46.20	52.13	61.37	68.27	78.94
bddm1pe	-19.90	96.48	37.01	47.26	56.11	63.69	75.59	84.09	97.73
c4h8o	-31.52	74.81	23.02	29.74	35.45	40.20	47.28	52.33	59.61
c3h5co	-3.26	73.62	17.15	20.96	24.30	27.21	31.93	35.43	40.70
metacrol	-26.69	79.43	22.55	28.49	33.80	38.49	46.23	52.06	59.81
c4h7o	13.35	78.58	21.83	28.23	33.37	37.51	43.64	48.34	63.63
ic8h18	-53.54	101.07	45.31	58.35	70.01	80.18	96.34	108.69	127.89
i2c8h16	-25.34	98.84	39.79	52.02	62.54	71.51	85.44	95.19	110.24
i1c8h16	-27.34	99.63	42.45	55.01	65.67	74.62	88.22	97.45	112.27
ic8h15	3.02	97.99	42.61	54.38	64.25	72.61	85.79	94.86	108.32
pc7h15	-3.81	98.92	38.52	49.26	58.53	66.48	79.08	88.19	101.50
bddm1pe1	34.70	97.52	36.35	46.05	54.30	61.29	72.24	80.11	92.82
hxol	-76.46	105.29	37.35	46.83	55.19	62.50	74.30	82.89	94.92
hxol1j	-33.80	107.77	37.10	45.89	53.50	60.09	70.78	78.77	89.84
hxol2j	-29.90	107.77	37.23	46.14	53.73	60.24	70.78	78.68	89.65
hxol3j	-29.90	107.77	37.23	46.14	53.73	60.24	70.78	78.68	89.65
hxol4j	-29.90	107.77	37.23	46.14	53.73	60.24	70.78	78.68	89.65
hxol5j	-29.90	107.77	37.13	45.93	53.54	60.13	70.81	78.79	89.85
hxol6j	-27.70	107.61	37.27	46.32	54.06	60.70	71.38	79.26	90.16
hxol2e	-47.41	100.51	34.06	43.19	51.02	57.71	68.19	75.81	89.95
hxol3e	-48.76	101.70	34.13	43.01	50.73	57.38	67.92	75.55	88.08
hxol4e	-48.68	101.92	34.65	43.19	50.68	57.20	67.70	75.46	87.97
hxol5e	-45.92	102.75	34.64	43.52	51.21	57.81	68.25	75.79	88.22

hxol4e6j	-17.78	101.12	33.91	42.37	49.61	55.80	65.61	72.82	84.39
hxol3e5j	-18.25	100.39	33.20	41.37	48.56	54.81	64.79	72.06	84.06
hxol2e4j	-16.90	98.84	33.26	41.74	48.98	55.16	64.94	72.15	85.69
hxol5e1j	-3.01	105.00	34.40	42.57	49.51	55.41	64.74	71.66	83.16
hxol4e1j	-5.77	104.16	34.41	42.25	48.99	54.80	64.19	71.33	82.92
hxol3e1j	-5.85	103.94	33.88	42.08	49.04	54.97	64.40	71.42	83.04
hxol2e1j	-17.90	99.41	33.12	41.51	48.81	55.10	65.04	72.30	85.94
pe1ol5j	-22.12	97.81	31.68	39.51	46.10	51.67	60.49	67.06	78.14
pe1ol4j	-24.32	97.96	31.53	39.13	45.59	51.10	59.92	66.59	77.84
pe1ol3j	-24.32	97.96	31.63	39.34	45.77	51.20	59.89	66.48	77.63
pe1ol2j	-24.32	97.96	31.63	39.34	45.77	51.20	59.89	66.48	77.63
pe1ol1j	-28.22	97.96	31.50	39.09	45.54	51.06	59.89	66.57	77.82
b1ol	-65.98	86.36	26.29	33.06	38.99	44.13	52.31	58.39	69.07
c4h9o	-14.67	83.27	24.55	31.24	36.97	41.86	49.58	55.26	64.42
b1ol4j	-17.17	88.44	26.20	32.56	37.86	42.32	49.40	54.73	63.90
b1ol3j	-19.37	88.59	26.06	32.18	37.35	41.75	48.84	54.26	63.59
b1ol2j	-19.37	88.59	26.16	32.38	37.53	41.86	48.80	54.15	63.40
b1ol1j	-23.27	88.59	26.03	32.14	37.31	41.71	48.80	54.24	63.59
c4h7oh	-37.44	82.01	23.70	29.39	34.45	38.87	45.90	51.03	59.96
ch2ch2ch2o	-12.81	79.68	20.78	25.45	29.36	32.70	38.13	42.30	48.33
pe1ol4e	-40.97	93.39	29.17	36.56	42.96	48.47	57.17	63.46	73.97
pe1ol2e4e	-16.24	86.75	27.05	34.35	40.26	45.01	51.95	57.03	72.91
b1ol3e	-36.03	84.04	23.69	29.61	34.73	39.12	46.08	51.13	59.74
b1ol2e4j	-6.53	81.19	22.95	28.58	33.37	37.44	43.83	48.35	53.92
b1jol3e	6.88	86.26	23.45	28.67	33.04	36.72	42.57	47.00	54.68
b1*o4ol	-85.88	93.36	27.57	33.66	38.88	43.33	50.37	55.68	67.27
b1j*o4ol	-50.58	94.81	26.59	31.99	36.56	40.44	46.63	51.41	62.30
c2h3ch2oh	-31.58	73.40	18.26	22.82	26.75	30.10	35.32	39.03	45.16
c2h3choh	-2.10	72.08	17.27	21.27	24.74	27.71	32.36	35.69	41.20
hoc2h4hco	-80.94	84.00	22.10	26.70	30.64	33.99	39.30	43.34	52.59
hoc2h4co	-45.63	85.44	21.13	25.03	28.31	31.09	35.55	39.08	47.61
c5h9hco-1	-29.99	98.58	32.87	40.67	47.38	53.13	62.21	68.94	82.16
c5h9co-1	5.32	100.04	31.89	39.00	45.06	50.23	58.46	64.67	77.16
c5h9hco-2	-32.75	97.74	32.93	40.30	46.81	52.52	61.77	68.54	78.09
c5h9co-2	2.56	99.20	31.95	38.63	44.49	49.63	58.02	64.28	73.02
c5h9hco-3	-30.68	101.26	31.39	39.53	46.52	52.52	62.03	68.97	79.34
c5h9co-3	6.22	102.38	30.56	38.09	44.56	50.10	58.87	65.24	74.70
pc2h4oh	-7.37	69.56	15.60	18.92	21.61	23.85	27.42	30.19	34.51
Ec5h9-2	41.13	83.43	25.93	32.24	37.59	42.16	49.56	55.16	63.42
hoch2hco	-74.78	74.14	17.00	19.85	22.37	24.59	28.23	31.01	35.73
hoch2co	-39.47	75.57	16.03	18.18	20.05	21.69	24.49	26.75	30.65
c4h5hco	-6.76	80.16	26.05	32.35	37.41	41.48	47.42	51.50	58.10
c4h5co	24.14	78.77	25.86	31.42	35.82	39.30	44.26	47.63	53.29
pe1jol4e	1.73	95.63	28.92	35.63	41.28	46.06	53.65	59.33	68.92
pe1ol3e5j	-12.83	91.75	28.44	35.41	41.37	46.46	54.53	60.48	70.16
pe1jol2e4e	13.27	85.59	26.10	32.66	38.04	42.40	48.79	53.52	69.28
hxol1o2	-68.94	117.16	41.64	52.39	61.57	69.32	80.97	88.19	91.73
hxol2o2	-65.27	120.28	43.85	54.05	62.89	70.46	82.07	89.42	92.09
hxol3o2	-65.27	120.28	43.85	54.05	62.89	70.46	82.07	89.42	92.09
hxol4o2	-65.27	120.28	43.85	54.05	62.89	70.46	82.07	89.42	92.09
hxol5o2	-65.81	120.28	43.85	54.05	62.89	70.46	82.07	89.42	92.09
hxol6o2	-60.76	121.39	43.10	53.44	62.22	69.64	81.07	89.15	103.29
hxol1o2h	-104.05	120.23	43.41	54.29	63.67	71.65	83.76	91.34	95.59
hxol2o2h	-100.38	124.73	45.62	55.95	64.99	72.79	84.85	92.58	95.95
hxol3o2h	-100.38	124.73	45.62	55.95	64.99	72.79	84.85	92.58	95.95
hxol4o2h	-100.38	124.73	45.62	55.95	64.99	72.79	84.85	92.58	95.95
hxol5o2h	-100.92	123.35	45.62	55.95	64.99	72.79	84.85	92.59	95.96

hxol6o2h	-95.87	124.47	44.87	55.34	64.33	71.97	83.85	92.31	107.11
hxol1o	-67.29	108.95	37.10	47.52	56.50	64.14	75.76	83.11	86.82
hxol2o	-62.81	112.07	39.31	49.19	57.82	65.27	76.85	84.35	87.18
hxol3o	-62.81	112.07	39.31	49.19	57.82	65.27	76.85	84.35	87.18
hxol4o	-62.81	112.07	39.31	49.19	57.82	65.27	76.85	84.35	87.18
hxol5o	-63.35	112.07	39.31	49.19	57.82	65.27	76.85	84.35	87.18
hxol6o	-60.40	113.18	38.55	48.59	57.16	64.44	75.85	84.09	98.37
hocho	-99990.48	59.07	9.90	11.50	13.09	14.50	16.57	18.12	20.39
hoco	-43.34	60.17	10.45	11.81	12.99	13.98	15.39	16.39	17.81
hcoo formy	-31.00	60.93	10.05	11.04	12.10	13.09	14.71	15.98	17.92
hxol2j1o2h	-57.44	122.49	43.29	53.59	62.21	69.39	80.24	87.12	90.30
hxol3j1o2h	-57.44	122.49	43.29	53.59	62.21	69.39	80.24	87.12	90.30
hxol4j1o2h	-57.44	122.49	43.29	53.59	62.21	69.39	80.24	87.12	90.30
hxol1j2o2h	-57.67	126.99	45.37	55.01	63.30	70.38	81.34	88.45	90.85
hxol3j2o2h	-53.77	126.99	45.51	55.25	63.52	70.53	81.33	88.36	90.67
hxol4j2o2h	-53.77	126.99	45.51	55.25	63.52	70.53	81.33	88.36	90.67
hxol5j2o2h	-53.77	126.99	45.40	55.05	63.34	70.42	81.37	88.48	90.86
hxol1j3o2h	-57.67	126.99	45.37	55.01	63.30	70.38	81.34	88.45	90.85
hxol2j3o2h	-53.77	126.99	45.51	55.25	63.52	70.53	81.33	88.36	90.67
hxol4j3o2h	-53.77	126.99	45.51	55.25	63.52	70.53	81.33	88.36	90.67
hxol5j3o2h	-53.77	126.99	45.40	55.05	63.34	70.42	81.37	88.48	90.86
hxol6j3o2h	-51.57	126.83	45.55	55.43	63.85	70.99	81.93	88.94	91.17
hxol1j4o2h	-57.67	126.99	45.37	55.01	63.30	70.38	81.34	88.45	90.85
hxol2j4o2h	-53.77	126.99	45.51	55.25	63.52	70.53	81.33	88.36	90.67
hxol3j4o2h	-53.77	126.99	45.51	55.25	63.52	70.53	81.33	88.36	90.67
hxol5j4o2h	-53.77	126.99	45.40	55.05	63.34	70.42	81.37	88.48	90.86
hxol6j4o2h	-51.57	126.83	45.55	55.43	63.85	70.99	81.93	88.94	91.17
hxol2j5o2h	-54.31	125.61	45.50	55.26	63.53	70.52	81.33	88.37	90.66
hxol3j5o2h	-54.31	125.61	45.50	55.26	63.53	70.52	81.33	88.37	90.66
hxol4j5o2h	-54.31	125.61	45.50	55.26	63.53	70.52	81.33	88.37	90.66
hxol6j5o2h	-52.81	125.46	45.55	55.44	63.86	70.99	81.93	88.95	91.17
hxol3j6o2h	-49.26	128.11	44.74	54.66	62.87	69.70	80.33	88.10	101.87
hxol4j6o2h	-49.26	128.11	44.74	54.66	62.87	69.70	80.33	88.10	101.87
hxol5j6o2h	-49.26	128.11	44.74	54.66	62.87	69.70	80.33	88.10	101.87
hxolcy2o1	-81.51	100.13	36.19	46.54	55.39	62.85	74.07	81.18	87.48
hxolcy3o1	-83.11	97.33	33.46	44.69	54.03	61.80	73.91	83.66	111.36
hxolcy4o1	-102.41	93.83	38.24	49.26	58.30	65.64	76.29	83.49	101.07
hxolcy3o2	-77.84	103.25	38.32	48.28	56.79	63.98	74.99	82.51	93.97
hxolcy4o2	-40.90	91.93	31.18	41.38	50.11	57.54	69.04	77.11	90.25
hxolcy5o2	-99.28	96.95	40.37	51.00	59.70	66.76	77.20	84.82	106.51
hxolcy4o3	-77.84	103.25	38.32	48.28	56.79	63.98	74.99	82.51	93.97
hxolcy5o3	-77.70	101.65	35.69	46.83	56.03	63.59	74.97	82.89	94.90
hxolcy6o3	-94.23	99.44	39.77	50.24	58.88	65.96	76.56	84.32	105.10
hxolcy5o4	-78.38	103.25	38.32	48.28	56.79	63.98	74.99	82.51	93.97
hxolcy6o4	-73.33	101.46	35.41	46.01	54.91	62.38	73.86	82.01	94.22
hxolcy6o5	-73.33	105.74	37.73	47.51	55.96	63.17	74.35	82.01	92.22
hxol1o2h2o	-93.45	135.43	49.78	61.62	71.36	79.28	90.74	98.12	112.02
hxol1o2h3o	-93.45	135.43	49.78	61.62	71.36	79.28	90.74	98.12	112.02
hxol1o2h4o	-93.45	135.43	49.79	61.61	71.36	79.28	90.74	98.12	112.02
hxol2o2h1o	-93.45	136.81	49.79	61.62	71.36	79.28	90.74	98.12	112.02
hxol2o2h3o	-89.78	138.55	51.91	63.37	72.76	80.40	91.65	99.46	118.42
hxol2o2h4o	-89.78	138.56	51.91	63.37	72.76	80.40	91.65	99.46	118.42
hxol2o2h5o	-90.32	138.56	51.92	63.36	72.76	80.41	91.66	99.45	118.36
hxol3o2h1o	-93.45	136.81	49.79	61.62	71.36	79.28	90.74	98.12	112.02
hxol3o2h2o	-89.78	139.93	51.91	63.37	72.76	80.40	91.65	99.46	118.42
hxol3o2h4o	-89.78	138.56	51.91	63.37	72.76	80.40	91.65	99.46	118.42
hxol3o2h5o	-90.32	138.56	51.92	63.36	72.76	80.41	91.66	99.45	118.36

hxol3o2h6o	-85.27	141.05	51.49	62.42	71.75	79.61	91.42	98.72	102.07
hxol4o2h1o	-93.45	136.81	49.79	61.62	71.36	79.28	90.74	98.12	112.02
hxol4o2h2o	-89.78	139.93	51.91	63.37	72.76	80.40	91.65	99.46	118.42
hxol4o2h3o	-89.78	139.93	51.91	63.37	72.76	80.40	91.65	99.46	118.42
hxol4o2h5o	-90.32	138.56	51.92	63.36	72.76	80.41	91.66	99.45	118.36
hxol4o2h6o	-85.27	139.67	51.49	62.42	71.75	79.61	91.43	98.71	102.07
hxol5o2h2o	-90.32	138.56	51.92	63.36	72.76	80.41	91.66	99.45	118.36
hxol5o2h3o	-90.32	138.55	51.92	63.36	72.76	80.41	91.65	99.45	118.36
hxol5o2h4o	-90.32	138.55	51.92	63.36	72.76	80.41	91.65	99.45	118.36
hxol5o2h6o	-85.27	139.67	51.50	62.41	71.74	79.62	91.43	98.70	102.07
hxol6o2h3o	-85.27	141.05	51.50	62.41	71.74	79.62	91.43	98.70	102.07
hxol6o2h4o	-85.27	141.05	51.50	62.41	71.74	79.62	91.43	98.70	102.07
hxol6o2h5o	-85.27	141.05	51.49	62.42	71.75	79.61	91.43	98.71	102.07
hxol1*o2o2	-144.16	124.47	45.81	56.52	65.52	72.98	84.02	91.25	103.19
hxol1*o3o2	-145.65	124.68	46.51	57.07	65.74	72.81	83.28	90.87	112.36
hxol1*o4o2	-145.65	124.68	46.51	57.07	65.74	72.81	83.28	90.87	112.36
hxol2*o1o2	-133.60	126.34	43.95	54.33	63.08	70.36	81.28	88.65	101.61
hxol2*o3o2	-125.02	130.24	46.13	56.32	64.83	71.89	82.62	90.38	108.87
hxol2*o4o2	-126.51	130.44	46.96	56.74	64.92	71.74	82.14	89.84	109.37
hxol2*o5o2	-127.05	129.06	46.96	56.74	64.92	71.74	82.14	89.84	109.37
hxol3*o1o2	-131.39	126.44	44.46	54.90	63.55	70.66	81.21	88.52	105.43
hxol3*o2o2	-126.23	130.74	45.77	56.21	64.85	71.95	82.61	90.38	110.93
hxol3*o4o2	-126.23	130.74	45.78	56.20	64.84	71.95	82.61	90.37	110.94
hxol3*o5o2	-128.26	129.56	46.60	56.64	64.95	71.79	82.13	89.84	111.43
hxol3*o6o2	-123.21	132.06	46.00	55.87	64.12	70.99	81.49	89.34	109.82
hxol4*o1o2	-131.39	126.44	44.46	54.90	63.55	70.66	81.21	88.52	105.43
hxol4*o2o2	-127.72	130.94	46.60	56.64	64.95	71.79	82.13	89.84	111.43
hxol4*o3o2	-126.23	130.74	45.77	56.21	64.85	71.95	82.61	90.38	110.93
hxol4*o5o2	-126.23	129.36	45.77	56.21	64.85	71.95	82.61	90.38	110.93
hxol4*o6o2	-123.21	132.06	46.00	55.87	64.12	70.99	81.49	89.34	109.82
hxol5*o2o2	-127.43	130.84	46.08	56.08	64.47	71.49	82.20	89.97	107.88
hxol5*o3o2	-127.43	130.84	46.08	56.08	64.47	71.49	82.20	89.97	107.88
hxol5*o4o2	-125.94	130.64	45.44	55.46	64.18	71.66	83.10	90.25	92.73
hxol5*o6o2	-122.00	131.56	46.36	55.98	64.10	70.93	81.50	89.35	107.73
hxol6*o3o2	-120.28	131.72	46.74	56.71	65.06	71.99	82.51	90.13	108.49
hxol6*o4o2	-120.28	131.72	46.74	56.72	65.06	71.99	82.51	90.14	108.45
hxol6*o5o2	-118.79	130.14	45.92	56.28	64.95	72.14	82.99	90.66	107.91
hxol2*o1j	-59.70	108.95	38.52	46.88	53.98	60.02	69.60	77.03	93.78
hxol3*o1j	-60.51	113.54	38.11	46.56	53.57	59.42	68.63	75.93	94.83
hxol4*o1j	-60.51	113.54	38.11	46.57	53.58	59.42	68.62	75.94	94.82
hxol3*o2j	-63.01	108.88	38.29	47.03	54.24	60.22	69.59	76.93	95.84
hxol4*o2j	-56.61	113.55	38.23	46.82	53.80	59.57	68.62	75.85	94.64
hxol5*o2j	-56.32	113.45	37.72	46.26	53.33	59.26	68.69	75.98	90.86
hxol2*o3j	-61.80	108.26	38.66	47.13	54.21	60.17	69.60	76.94	93.60
hxol4*o3j	-63.01	108.79	38.29	47.03	54.24	60.22	69.59	76.94	95.82
hxol5*o3j	-56.32	113.45	37.72	46.26	53.33	59.26	68.69	75.98	90.86
hxol6*o3j	-49.17	114.33	38.38	46.90	53.91	59.76	68.99	76.14	91.51
hxol2*o4j	-55.40	113.05	38.60	46.92	53.78	59.51	68.63	75.85	92.40
hxol3*o4j	-63.01	108.83	38.29	47.03	54.24	60.22	69.59	76.94	95.84
hxol5*o4j	-62.72	108.70	37.78	46.46	53.76	59.92	69.66	77.06	92.07
hxol6*o4j	-49.17	114.33	38.38	46.90	53.91	59.76	68.99	76.14	91.51
hxol2*o5j	-55.40	113.05	38.50	46.71	53.60	59.40	68.67	75.96	92.60
hxol3*o5j	-56.61	113.55	38.14	46.60	53.62	59.46	68.66	75.96	94.84
hxol4*o5j	-63.01	109.24	38.18	46.81	54.05	60.11	69.62	77.04	96.01
hxol6*o5j	-55.57	110.05	38.41	47.09	54.33	60.41	69.96	77.22	92.70
hxol3*o6j	-54.41	113.39	38.28	46.99	54.13	60.03	69.22	76.43	95.15
hxol4*o6j	-54.41	113.39	38.29	46.98	54.13	60.03	69.22	76.42	95.14

hxol5*o6j	-56.72	110.31	37.57	46.46	53.96	60.28	70.20	77.61	92.55
c5h10cooh-	-80.94	102.57	38.20	47.47	55.03	61.24	70.73	77.97	96.77
c5h10cooh-	-74.54	107.29	38.15	47.25	54.60	60.58	69.77	76.87	95.59
c5h10cooh-	-74.54	107.29	38.15	47.25	54.60	60.58	69.77	76.87	95.59
ch2cooh	-57.77	66.59	15.70	19.03	21.72	23.90	27.13	29.36	32.96
ch2ch2cooh	-57.50	79.03	21.80	26.55	30.19	33.02	37.15	40.44	52.03
c2h3cooh	-80.39	75.17	18.69	22.93	26.50	29.50	34.01	37.06	42.17
hoch2coch2	-40.67	81.70	21.53	25.69	29.20	32.19	36.99	40.60	46.24
c2h3coch2o	-64.73	87.27	25.50	30.53	34.86	38.59	44.55	48.98	55.76
c2h3cochoh	-34.67	82.92	25.12	30.45	34.76	38.23	43.32	46.78	52.02
c3h7coc2h3	-40.65	98.03	32.97	40.89	47.67	53.47	62.68	69.45	79.78
c3h6coc2h3	8.35	100.64	32.17	39.50	45.77	51.12	59.57	65.76	75.17
c3h6coc2h3	5.70	102.47	31.30	38.52	44.77	50.17	58.79	65.08	74.27
c3h6coc2h3	1.65	96.87	33.31	41.03	47.50	52.91	61.26	67.24	76.37
c2h5coc3h5	-35.75	100.81	31.96	39.98	46.85	52.73	62.07	68.94	79.42
c2h5coc3h4	-11.85	96.76	29.85	38.05	44.96	50.79	59.84	66.34	76.13
ch3coc4h7-	-37.13	97.69	32.20	40.03	46.80	52.63	61.89	68.78	81.61
Cc6e5oB	3.07	95.16	32.14	39.55	45.77	51.02	59.35	65.64	77.63
Dc6e5oB	-5.63	96.45	31.38	38.59	44.81	50.16	58.73	65.17	77.43
b1ol2*o4j	-43.30	94.16	27.71	33.18	37.62	41.29	47.09	51.75	63.57
b1ol3*o4j	-46.83	91.57	26.64	32.54	37.47	41.59	48.05	52.93	63.19
pe1ol3*o5j	-49.46	104.03	32.81	40.03	45.89	50.69	58.15	64.09	80.39
pe1ol4*o5j	-51.77	100.94	32.10	39.50	45.71	50.94	59.13	65.27	77.88
pe1*o5ol	-90.83	102.71	33.04	40.62	47.13	52.68	61.44	68.02	81.96
pe1j*o5ol	-55.52	104.18	32.06	38.95	44.80	49.78	57.70	63.75	76.97
pe1ol3*o4e	-66.53	100.05	30.00	36.24	41.84	46.81	54.82	60.27	63.13
pe1ol3*o4e	-29.22	95.91	30.90	37.51	42.97	47.48	54.29	59.07	66.31
pe1jol3*o4	-29.62	97.85	30.90	37.00	42.11	46.39	53.05	57.90	65.51
c2h3coch2h	-53.22	93.70	26.81	33.18	38.55	43.06	50.02	54.91	61.90
c2h3coch2c	-16.32	94.82	25.96	31.74	36.59	40.65	46.86	51.18	57.25
c2h3cohco	-43.82	82.00	22.46	27.20	31.18	34.50	39.56	43.06	47.90
c2h3coco	-12.92	80.61	22.31	26.30	29.60	32.32	36.38	39.15	43.06
c6oAoD	-87.28	107.11	36.59	44.65	51.44	57.14	66.11	73.20	92.66
c6oyAoD	-51.97	108.58	35.61	42.98	49.11	54.25	62.37	68.93	87.97
VINacrol	-6.76	80.16	25.95	32.36	37.53	41.66	47.51	51.10	55.35
P2c4h614	29.72	101.64	36.46	46.54	54.94	61.96	72.74	80.36	92.86
P2c4h513	8.00	93.90	35.59	45.30	53.49	60.32	70.60	77.52	89.20
ch2ch2ch2h	-.43	86.95	24.08	28.96	33.25	37.02	43.16	47.79	54.78
Ac5oB	-19.51	93.70	29.99	36.81	42.66	47.68	55.65	61.51	70.39
etvinket	-30.69	88.88	26.84	32.83	38.21	43.00	50.75	56.09	58.94
c2h3coc2h4	13.28	91.22	26.67	32.52	37.51	41.76	48.46	53.37	60.86
c7h16-3	-67.17	100.88	39.60	50.52	59.96	68.06	80.77	89.44	106.38
c7h15-3z	-.28	104.30	38.84	49.16	58.07	65.71	77.64	85.73	101.76
c7h15-3a	-.28	104.30	38.84	49.16	58.07	65.71	77.64	85.73	101.76
c7h15-3f	-.28	104.30	38.84	49.16	58.07	65.71	77.64	85.73	101.76
c7h15-3b	-.94	105.32	38.03	48.22	57.17	64.98	77.66	87.08	101.15
c7h15-3d	-.94	105.32	38.03	48.22	57.17	64.98	77.66	87.08	101.15
c7h15-3e	-.94	105.32	38.03	48.22	57.17	64.98	77.66	87.08	101.15
c7h15-3c	-3.07	105.24	37.03	45.01	51.66	57.01	64.04	66.53	100.99
c7h14-1-3	-18.42	100.01	37.68	47.55	56.09	63.47	75.29	84.04	97.37
c7h14-2-3	-21.36	99.18	37.42	47.11	55.56	62.91	74.80	83.66	97.17
c7h14-3-3	-19.66	98.74	36.26	46.53	55.37	62.95	75.04	83.94	97.48
c7h14-4-3	-20.08	98.36	36.58	46.61	55.30	62.82	74.88	83.82	97.40
c7h14-5-3	-17.14	99.19	36.84	47.05	55.83	63.38	75.38	84.21	97.60
c7h14-z-3	-17.14	99.19	36.84	47.05	55.83	63.38	75.38	84.21	97.60
c7h13-1-3	37.24	100.55	35.89	45.29	53.42	60.44	71.69	80.02	92.73
c8h18-3	-52.22	110.30	45.14	57.57	68.35	77.68	92.67	103.78	120.60

c8h17-3a	-3.22	113.72	44.37	56.19	66.43	75.29	89.51	100.03	115.94
c8h17-3b	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-3c	-7.82	115.54	44.29	55.16	64.87	73.51	87.83	98.74	115.20
c8h17-3d	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-3e	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-3f	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-3g	-3.22	113.72	44.37	56.19	66.43	75.29	89.51	100.03	115.94
c8h17-3z	-3.22	113.72	44.37	56.19	66.43	75.29	89.51	100.03	115.94
c8h16-1-3	-21.82	108.61	42.35	54.05	64.12	72.75	86.46	96.51	111.75
c8h15-1a-3	24.53	113.05	40.71	51.68	61.18	69.39	82.52	92.15	106.49
c8h16-2-3	-26.29	108.60	42.88	54.08	63.82	72.27	85.88	96.00	111.36
c8h15-2a-3	20.06	113.04	41.30	51.72	60.88	68.90	81.94	91.66	106.12
c8h16-3-3	-26.29	108.60	42.88	54.08	63.82	72.27	85.88	96.00	111.36
c8h15-3a-3	20.06	113.04	41.30	51.72	60.88	68.90	81.94	91.66	106.12
c8h16-4-3	-24.59	108.16	41.73	53.50	63.63	72.31	86.12	96.26	111.68
c8h15-4a-3	21.76	112.60	40.10	51.13	60.70	68.97	82.20	91.92	106.45
c8h16-5-3	-25.01	107.78	42.08	53.58	63.54	72.15	85.94	96.14	111.58
c8h15-5a-3	21.34	112.22	40.44	51.21	60.62	68.80	82.02	91.79	106.34
c8h16-6-3	-22.07	108.61	42.34	54.02	64.07	72.71	86.44	96.53	111.78
c8h15-6a-3	24.28	113.05	40.71	51.65	61.14	69.36	82.51	92.17	106.54
c8h16-z-3	-23.18	109.81	42.83	54.42	64.38	72.94	86.53	96.52	111.72
c8h15-za-3	23.17	114.25	41.21	52.05	61.45	69.59	82.61	92.18	106.48
c8h15-3	21.76	112.60	40.10	51.13	60.70	68.97	82.20	91.92	106.45
c8h15-1-3	21.76	112.60	40.10	51.13	60.70	68.97	82.20	91.92	106.45
c7h16-24	-47.93	98.20	39.47	50.53	60.13	68.43	81.77	91.66	106.66
c7h15-24a	1.07	101.61	38.69	49.15	58.22	66.05	78.61	87.91	102.01
c7h15-24b	-3.53	103.44	38.49	48.14	56.76	64.42	77.11	86.78	101.37
c7h15-24c	-1.58	102.64	37.83	48.17	57.21	65.09	77.83	87.30	101.46
c7h14-1-24	-19.86	97.33	37.48	47.48	56.12	63.56	75.46	84.26	97.68
c7h14-2-24	-22.55	96.50	37.25	47.09	55.63	63.03	74.96	83.85	97.45
c7h13-1-24	26.45	99.91	36.47	45.71	53.72	60.65	71.81	80.11	92.79
c7h15oh-1-	-83.74	108.84	42.42	53.97	63.89	72.39	85.87	95.74	110.74
c7h15o-1-2	-31.77	107.38	41.48	52.67	62.28	70.50	83.49	92.92	106.97
c7h15oh-2-	-90.54	105.78	43.47	55.10	65.00	73.43	86.70	96.36	111.17
c7h15o-2-2	-38.57	104.32	42.52	53.79	63.39	71.54	84.32	93.55	107.38
c7h15oh-3-	-88.11	106.85	42.87	54.67	64.72	73.25	86.67	96.46	111.47
c7h15o-3-2	-36.14	105.39	42.05	53.35	63.00	71.23	84.19	93.62	107.71
c8h18-25	-52.86	107.62	44.98	57.52	68.39	77.78	92.84	103.98	120.86
c8h17-25a	-3.86	111.03	44.03	56.09	66.49	75.44	89.74	100.28	116.27
c8h17-25b	-8.46	112.86	43.86	55.02	64.92	73.66	88.08	99.01	115.56
c8h17-25c	-6.51	112.06	43.31	55.14	65.46	74.44	88.90	99.62	115.66
c8h16-1-25	-24.79	106.75	42.98	54.48	64.39	72.93	86.55	96.61	111.90
c8h16-2-25	-27.73	105.92	42.72	54.04	63.86	72.37	86.05	96.22	111.69
c8h16-3-25	-24.98	105.48	41.54	53.47	63.70	72.45	86.31	96.47	111.92
c8h15-1-25	24.02	108.89	40.77	52.10	61.79	70.07	83.16	92.73	107.27
c8h17oh-1-	-88.67	118.26	47.94	60.95	72.14	81.72	96.93	108.08	125.00
c8h17o-1-2	-36.70	116.80	46.99	59.65	70.52	79.83	94.55	105.26	121.22
c8h17oh-2-	-95.47	115.20	48.98	62.07	73.25	82.76	97.76	108.70	125.43
c8h17o-2-2	-43.50	113.74	48.03	60.77	71.63	80.87	95.38	105.89	121.64
c8h17oh-3-	-93.04	116.27	48.60	61.70	72.90	82.47	97.60	108.68	125.60
c8h17o-3-2	-41.07	114.81	47.57	60.34	71.26	80.57	95.25	105.94	121.92
c8h17oh1-3	-88.03	120.94	48.23	61.02	72.06	81.56	96.74	107.92	124.95
c8h17o-1-3	-36.06	119.48	47.27	59.72	70.45	79.67	94.36	105.11	121.17
c8h17oh2-3	-92.40	118.95	48.88	61.80	72.87	82.36	97.40	108.45	125.33
c8h17o-2-3	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17oh3-3	-94.83	117.88	49.27	62.14	73.17	82.61	97.57	108.55	125.38
c8h17o-3-3	-42.86	116.42	48.30	60.84	71.56	80.73	95.20	105.74	121.58

c8h17oh4-3	-92.40	118.95	48.88	61.80	72.87	82.36	97.40	108.45	125.33
c8h17o-4-3	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17oh5-3	-92.40	118.95	48.88	61.80	72.87	82.36	97.40	108.45	125.33
c8h17o-5-3	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17oh6-3	-92.40	118.95	48.88	61.80	72.87	82.36	97.40	108.45	125.33
c8h17o-6-3	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17oh7-3	-88.03	120.94	48.23	61.02	72.06	81.56	96.74	107.92	124.95
c8h17o-7-3	-36.06	119.48	47.27	59.72	70.45	79.67	94.36	105.11	121.17
c8h17ohz-3	-88.03	120.94	48.23	61.02	72.06	81.56	96.74	107.92	124.95
c8h17o-z-3	-36.06	119.48	47.27	59.72	70.45	79.67	94.36	105.11	121.17
c8h17ooh-1	-73.42	129.93	53.52	66.54	77.79	87.46	102.87	114.17	131.03
c8h17oo-1-	-40.01	128.78	51.40	63.62	74.23	83.42	98.22	109.19	125.72
c8ooh1-3b	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8ooh1-3c	-29.01	135.17	52.68	64.28	74.57	83.65	98.52	109.65	125.99
c8ooh1-3d	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8ooh1-3e	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8ooh1-3z	-24.41	133.35	52.73	65.16	75.87	85.07	99.72	110.42	126.38
c8h17ooh-2	-76.88	127.13	53.67	66.93	78.29	87.98	103.28	114.40	131.06
c8h17oo-2-	-43.47	125.98	51.55	64.00	74.73	83.94	98.62	109.43	125.79
c8ooh2-3a	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8ooh2-3c	-32.47	132.37	52.81	64.63	75.02	84.11	98.87	109.83	126.02
c8ooh2-3d	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh2-3e	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh2-3f	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh2-3z	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8h17ooh-3	-79.41	125.47	54.43	67.57	78.79	88.34	103.39	114.34	130.96
c8h17oo-3-	-46.00	124.32	52.32	64.66	75.24	84.31	98.73	109.36	125.65
c8ooh3-3a	-30.40	128.89	53.65	66.19	76.87	85.95	100.23	110.59	126.31
c8ooh3-3b	-33.05	129.91	52.72	65.20	75.90	85.05	99.47	109.89	125.38
c8ooh3-3d	-33.05	129.91	52.72	65.20	75.90	85.05	99.47	109.89	125.38
c8ooh3-3e	-33.05	129.91	52.72	65.20	75.90	85.05	99.47	109.89	125.38
c8ooh3-3f	-33.05	129.91	52.72	65.20	75.90	85.05	99.47	109.89	125.38
c8ooh3-3g	-30.40	128.89	53.65	66.19	76.87	85.95	100.23	110.59	126.31
c8ooh3-3z	-30.40	128.89	53.65	66.19	76.87	85.95	100.23	110.59	126.31
c8h17ooh-4	-76.88	127.13	53.67	66.93	78.29	87.98	103.28	114.40	131.06
c8h17oo-4-	-43.47	125.98	51.55	64.00	74.73	83.94	98.62	109.43	125.79
c8ooh4-3a	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8ooh4-3b	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh4-3c	-32.47	132.37	52.81	64.63	75.02	84.11	98.87	109.83	126.02
c8ooh4-3e	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh4-3f	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh4-3g	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8ooh4-3z	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8h17ooh-5	-76.88	127.13	53.67	66.93	78.29	87.98	103.28	114.40	131.06
c8h17oo-5-	-43.47	125.98	51.55	64.00	74.73	83.94	98.62	109.43	125.79
c8ooh5-3a	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8ooh5-3b	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh5-3c	-32.47	132.37	52.81	64.63	75.02	84.11	98.87	109.83	126.02
c8ooh5-3d	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh5-3f	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh5-3g	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8ooh5-3z	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8h17ooh-6	-76.88	127.13	53.67	66.93	78.29	87.98	103.28	114.40	131.06
c8h17oo-6-	-43.47	125.98	51.55	64.00	74.73	83.94	98.62	109.43	125.79
c8ooh6-3b	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh6-3c	-32.47	132.37	52.81	64.63	75.02	84.11	98.87	109.83	126.02
c8ooh6-3d	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50

c8ooh6-3e	-30.52	131.57	51.94	64.55	75.40	84.70	99.38	109.97	125.50
c8ooh6-3g	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8ooh6-3z	-27.87	130.55	52.88	65.54	76.36	85.59	100.12	110.66	126.45
c8h17ooh-7	-73.42	129.93	53.52	66.54	77.79	87.46	102.87	114.17	131.03
c8h17oo-7-	-40.01	128.78	51.40	63.62	74.23	83.42	98.22	109.19	125.72
c8ooh7-3c	-29.01	135.17	52.68	64.28	74.57	83.65	98.52	109.65	125.99
c8ooh7-3d	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8ooh7-3e	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8ooh7-3f	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8h17ooh-z	-73.42	129.93	53.52	66.54	77.79	87.46	102.87	114.17	131.03
c8h17oo-z-	-40.01	128.78	51.40	63.62	74.23	83.42	98.22	109.19	125.72
c8oohz-3a	-24.41	133.35	52.73	65.16	75.87	85.07	99.72	110.42	126.38
c8oohz-3b	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8oohz-3c	-29.01	135.17	52.68	64.28	74.57	83.65	98.52	109.65	125.99
c8oohz-3d	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8oohz-3e	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8oohz-3f	-27.06	134.37	51.80	64.17	74.91	84.18	98.97	109.74	125.45
c8h17oohoo	-98.07	146.76	61.67	75.86	88.04	98.44	114.75	126.36	142.69
c8ooh1-oo2	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh2-oo1	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh1-oo4	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh4-oo1	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh1-oo5	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh5-oo1	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh2-ooz	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8oohz-oo2	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh4-ooz	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8oohz-oo4	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh5-ooz	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8oohz-oo5	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh6-ooz	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8oohz-oo6	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh4-oo7	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh7-oo4	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh5-oo7	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh7-oo5	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh6-oo7	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8ooh7-oo6	-64.66	145.61	59.66	73.02	84.53	94.41	110.01	121.22	137.20
c8h17oohoo	-94.61	149.57	61.44	75.43	87.54	97.95	114.43	126.22	142.70
c8ooh1-ooz	-61.20	148.42	59.46	72.59	83.99	93.84	109.52	120.88	137.05
c8oohz-oo1	-61.20	148.42	59.46	72.59	83.99	93.84	109.52	120.88	137.05
c8h17oohoo	-100.60	145.10	62.45	76.59	88.70	99.02	115.16	126.61	142.79
c8ooh1-oo3	-67.20	143.95	60.49	73.76	85.15	94.89	110.22	121.23	137.11
c8ooh3-oo1	-67.20	143.95	60.49	73.76	85.15	94.89	110.22	121.23	137.11
c8ooh7-oo3	-67.20	143.95	60.49	73.76	85.15	94.89	110.22	121.23	137.11
c8ooh3-oo7	-67.20	143.95	60.49	73.76	85.15	94.89	110.22	121.23	137.11
c8oohz-oo3	-67.20	143.95	60.49	73.76	85.15	94.89	110.22	121.23	137.11
c8ooh3-ooz	-67.20	143.95	60.49	73.76	85.15	94.89	110.22	121.23	137.11
c8h17oohoo	-101.53	143.96	61.86	76.27	88.56	98.99	115.21	126.66	142.81
c8ooh2-oo4	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh4-oo2	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh2-oo5	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh5-oo2	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh2-oo6	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh6-oo2	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh4-oo5	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh5-oo4	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22

c8ooh4-oo6	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh6-oo4	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh5-oo6	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8ooh6-oo5	-68.13	142.81	59.87	73.43	85.03	94.90	110.37	121.40	137.22
c8h17oohoo	-104.06	142.30	62.67	77.00	89.18	99.48	115.46	126.73	142.76
c8ooh2-oo3	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8ooh3-oo2	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8ooh4-oo3	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8ooh3-oo4	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8ooh5-oo3	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8ooh3-oo5	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8ooh6-oo3	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8ooh3-oo6	-70.66	141.15	60.67	74.18	85.69	95.46	110.71	121.58	137.26
c8h16o1-2-	-48.76	113.95	44.52	57.33	68.22	77.45	91.88	102.27	117.82
c8h16o6-7-	-48.76	113.95	44.52	57.33	68.22	77.45	91.88	102.27	117.82
c8h16o1-3-	-52.93	110.35	43.11	56.19	67.32	76.77	91.55	102.19	118.09
c8h16o1-4-	-70.54	109.39	40.86	54.43	65.98	75.79	91.15	102.18	118.54
c8h16o4-7-	-70.54	109.39	40.86	54.43	65.98	75.79	91.15	102.18	118.54
c8h16o5-z-	-70.54	109.39	40.86	54.43	65.98	75.79	91.15	102.18	118.54
c8h16o1-5-	-74.80	100.05	40.77	54.64	66.48	76.54	92.28	103.55	120.02
c8h16o6-z-	-74.80	100.05	40.77	54.64	66.48	76.54	92.28	103.55	120.02
c8h16o2-3-	-55.56	110.89	45.49	58.48	69.42	78.60	92.80	102.95	118.27
c8h16o3-4-	-55.56	110.89	45.49	58.48	69.42	78.60	92.80	102.95	118.27
c8h16o2-4-	-54.87	109.43	42.89	56.60	68.11	77.74	92.57	103.10	118.90
c8h16o4-6-	-54.87	109.43	42.89	56.60	68.11	77.74	92.57	103.10	118.90
c8h16o2-5-	-74.91	107.40	41.00	55.16	67.05	77.00	92.30	103.14	119.34
c8h16o2-6-	-79.17	98.06	40.95	55.43	67.59	77.77	93.41	104.46	120.74
c8h16o2-z-	-50.50	110.05	42.70	55.82	67.00	76.51	91.40	102.13	118.09
c8h16o4-z-	-50.50	110.05	42.70	55.82	67.00	76.51	91.40	102.13	118.09
c8h16o5-7-	-50.50	110.05	42.70	55.82	67.00	76.51	91.40	102.13	118.09
c8h16o3-5-	-57.30	108.36	43.45	56.85	68.14	77.63	92.33	102.83	118.60
c8h16o3-6-	-77.34	106.33	41.86	55.53	67.09	76.84	91.98	102.80	118.93
c8h16o3-7-	-77.23	98.98	41.18	55.03	66.82	76.82	92.43	103.60	119.99
c8h16o3-z-	-51.19	111.51	45.12	57.78	68.55	77.68	91.98	102.30	117.77
c8h16o1-z-	-66.17	110.02	40.20	53.67	65.20	75.04	90.51	101.66	118.13
c8h16o4-5-	-53.13	111.96	44.82	58.00	69.12	78.47	92.93	103.21	118.44
c8h16o5-6-	-53.13	111.96	44.82	58.00	69.12	78.47	92.93	103.21	118.44
c8ket1-2-3	-93.83	132.90	54.55	67.73	78.85	88.18	102.57	112.74	127.69
c8ket7-6-3	-93.83	132.90	54.55	67.73	78.85	88.18	102.57	112.74	127.69
c8ket1-z-3	-92.59	136.79	54.95	67.17	77.68	86.70	101.02	111.46	126.97
c8ketz-1-3	-92.59	136.79	54.95	67.17	77.68	86.70	101.02	111.46	126.97
c8ket1-3-3	-98.58	132.32	55.88	68.20	78.68	87.57	101.52	111.62	126.89
c8ket7-3-3	-98.58	132.32	55.88	68.20	78.68	87.57	101.52	111.62	126.89
c8ket1-4-3	-96.05	133.98	55.09	67.55	78.17	87.22	101.42	111.69	127.02
c8ket1-5-3	-96.05	133.98	55.09	67.55	78.17	87.22	101.42	111.69	127.02
c8ket7-4-3	-96.05	133.98	55.09	67.55	78.17	87.22	101.42	111.69	127.02
c8ket7-5-3	-96.05	133.98	55.09	67.55	78.17	87.22	101.42	111.69	127.02
c8ketz-4-3	-96.05	133.98	55.09	67.55	78.17	87.22	101.42	111.69	127.02
c8ketz-5-3	-96.05	133.98	55.09	67.55	78.17	87.22	101.42	111.69	127.02
c8ketz-6-3	-96.05	133.98	55.09	67.55	78.17	87.22	101.42	111.69	127.02
c8ket2-1-3	-96.57	135.55	53.29	66.78	78.11	87.60	102.19	112.48	127.67
c8ket2-3-3	-103.78	131.45	54.44	67.51	78.64	88.08	102.78	113.23	128.26
c8ket2-4-3	-103.03	133.09	53.29	66.29	77.39	86.84	101.65	112.25	127.65
c8ket2-5-3	-103.03	133.09	53.29	66.29	77.39	86.84	101.65	112.25	127.65
c8ket2-6-3	-103.03	133.09	53.29	66.29	77.39	86.84	101.65	112.25	127.65
c8ket2-z-3	-99.77	135.52	53.56	65.92	76.63	85.88	100.64	111.42	127.17
c8ket4-1-3	-99.96	136.07	53.96	66.45	77.17	86.34	100.86	111.43	127.16
c8ket4-7-3	-99.96	136.07	53.96	66.45	77.17	86.34	100.86	111.43	127.16
c8ket4-z-3	-99.96	136.07	53.96	66.45	77.17	86.34	100.86	111.43	127.16
c8ket4-2-3	-103.42	133.27	54.08	66.82	77.65	86.85	101.25	111.66	127.21
c8ket4-6-3	-103.42	133.27	54.08	66.82	77.65	86.85	101.25	111.66	127.21
c8ket4-3-3	-104.17	131.63	55.19	68.04	78.93	88.12	102.44	112.67	127.82
c8ket4-5-3	-101.20	132.19	53.45	66.99	78.36	87.86	102.45	112.72	127.86
c8ket5-1-3	-100.43	135.88	54.84	67.05	77.52	86.50	100.72	111.14	126.80
c8ket5-7-3	-100.43	135.88	54.84	67.05	77.52	86.50	100.72	111.14	126.80
c8ket5-z-3	-100.43	135.88	54.84	67.05	77.52	86.50	100.72	111.14	126.80
c8ket5-2-3	-103.89	133.08	55.10	67.47	78.01	86.98	101.10	111.40	127.02
c8ket5-4-3	-101.67	132.00	54.46	67.64	78.72	88.01	102.30	112.45	127.58
c8ket5-6-3	-101.67	132.00	54.46	67.64	78.72	88.01	102.30	112.45	127.58
c8ket5-3-3	-106.42	131.42	55.78	68.09	78.54	87.38	101.24	111.31	126.74
c8ket6-2-3	-82.18	148.30	54.93	68.40	79.99	89.91	105.47	116.47	131.28
c8ket6-4-3	-82.18	148.30	54.93	68.40	79.99	89.91	105.47	116.47	131.28
c8ket6-3-3	-106.03	131.24	55.18	67.54	78.09	87.06	101.18	111.45	126.94
c8ket6-5-3	-101.28	131.82	53.84	67.08	78.26	87.67	102.23	112.55	127.71
c8ket6-7-3	-97.04	135.36	54.31	67.45	78.50	87.77	102.06	112.22	127.42
c8ket6-z-3	-100.04	135.70	54.25	66.51	77.10	86.20	100.69	111.29	127.02
c8ketz-2-3	-95.58	134.17	54.06	66.97	77.98	87.34	101.98	112.45	127.67
c8ketz-3-3	-96.33	132.53	55.23	68.11	79.05	88.31	102.72	112.98	127.95
ac6h13	6.64	94.88	33.39	42.22	49.91	56.58	67.34	75.35	87.53
bc6h13	1.84	95.32	33.25	41.18	48.37	54.83	65.70	74.10	86.82
cc6h13	3.99	95.90	32.54	41.25	48.92	55.64	66.58	74.75	86.96
dc6h13	3.99	95.90	32.54	41.25	48.92	55.64	66.58	74.75	86.96
ec6h13	6.64	94.88	33.39	42.22	49.91	56.58	67.34	75.35	87.53
ac6h12	-13.49	90.59	32.21	40.58	47.84	54.12	64.21	71.71	83.18
bc6h12	-16.43	89.76	31.95	40.14	47.31	53.56	63.72	71.33	82.98
cc6h12	-14.90	88.94	31.16	39.68	47.08	53.49	63.79	71.46	83.14
dc6h12	-12.21	89.77	31.33	40.04	47.55	54.00	64.28	71.86	83.38
ic6h11	16.40	83.87	29.34	37.36	44.38	50.51	60.47	67.91	79.08
c6h14-3	-42.36	91.46	34.16	43.60	51.82	58.96	70.50	79.10	92.18
lc6h13	6.64	94.88	33.39	42.22	49.91	56.58	67.34	75.35	87.53
mc6h13	3.99	95.90	32.54	41.25	48.92	55.64	66.58	74.75	86.96
nc6h13	1.84	95.32	33.25	41.18	48.37	54.83	65.70	74.10	86.82
oc6h13	6.64	94.88	33.39	42.22	49.91	56.58	67.34	75.35	87.53
neoc6h14	-45.23	85.06	34.64	44.65	53.20	60.49	71.95	80.22	92.58
fc6h13	3.77	90.65	33.86	43.26	51.28	58.10	68.79	76.47	87.93
gc6h13	1.12	89.50	33.04	42.29	50.28	57.14	68.01	75.86	87.31
hc6h13	3.77	88.47	33.86	43.26	51.28	58.10	68.79	76.47	87.93
neoc6h12	-14.07	83.37	31.80	41.10	48.94	55.55	65.75	72.97	83.71
neoc6h11	42.83	85.18	31.45	39.88	47.01	53.04	62.40	69.06	78.95
jc6h12	-15.48	87.91	32.00	40.55	47.92	54.27	64.41	71.92	83.43
kc6h12	-20.12	86.14	32.93	40.70	47.58	53.65	63.65	71.26	82.94
lc6h12	-11.96	89.77	31.37	40.09	47.59	54.03	64.28	71.83	83.34
mc6h12	-16.43	89.76	31.95	40.14	47.31	53.56	63.72	71.33	82.98
nc6h12	-13.32	89.60	31.86	40.48	47.89	54.26	64.40	71.88	83.34
ac5h11	11.95	85.13	27.98	35.33	41.74	47.31	56.33	63.08	73.40
bc5h11	7.35	86.95	27.77	34.30	40.25	45.64	54.77	61.89	72.73
cc5h11	9.30	86.15	27.14	34.35	40.73	46.35	55.55	62.47	72.85
dc5h11	11.95	85.13	27.98	35.33	41.74	47.31	56.33	63.08	73.40
ac5h10	-8.56	81.17	26.72	33.61	39.59	44.78	53.15	59.39	68.99
bc5h10	-11.67	79.96	26.80	33.27	39.02	44.09	52.47	58.85	68.63
cc5h10	-7.03	80.35	25.83	33.11	39.36	44.72	53.24	59.52	69.12
ic5h9	24.94	77.36	25.22	31.78	37.49	42.44	50.40	56.30	65.07
c7h15-3	1.30	108.00	38.24	48.28	57.12	64.87	77.48	86.88	100.82
c6h13-2	6.23	98.58	32.76	41.31	48.87	55.52	66.41	74.55	86.63

c5h11-2	11.33	88.94	27.30	34.31	40.58	46.15	55.34	62.26	72.51
c4h8-1	.07	73.51	20.62	26.22	31.06	35.25	41.98	47.00	54.71
c5h10-2	-7.98	82.20	25.81	32.71	38.75	44.01	52.54	58.93	68.67
c5h10-1	-5.04	83.04	26.08	33.15	39.28	44.56	53.04	59.31	68.88
c7h14-1-2	-18.42	100.01	37.68	47.55	56.09	63.47	75.29	84.04	97.37
c6h13-3	6.23	98.58	32.76	41.31	48.87	55.52	66.41	74.55	86.63
c5h11-1	13.98	87.92	27.64	35.14	41.65	47.28	56.33	63.03	73.16
Bc4h7-2	53.68	74.21	20.31	24.62	28.52	32.03	37.95	42.54	49.57
Bc4h7-1	56.80	75.43	20.24	24.96	29.10	32.72	38.62	43.08	49.93
c7h15-2a	1.71	104.30	38.85	49.21	58.19	65.97	78.46	87.72	101.76
sc3h5cho	-28.19	75.99	22.27	27.41	31.76	35.44	41.16	45.26	51.38
c7h14-1-2	-18.42	100.01	37.68	47.55	56.09	63.47	75.29	84.04	97.37
nc3h7coc2h	-27.33	97.72	34.53	42.71	49.77	55.85	65.58	72.80	83.79
nc3h7coc2h	-67.14	100.09	35.73	44.16	51.50	57.88	68.17	75.86	87.54
c3h6coc2h5	-20.78	104.53	34.25	41.85	48.59	54.53	64.29	71.63	82.52
c3h6coc2h5	-18.13	103.51	34.98	42.79	49.58	55.48	65.01	72.14	83.03
c7h13-1-2	37.24	100.55	35.89	45.29	53.42	60.44	71.69	80.02	92.73
ic3h6cho	-2.20	83.08	22.80	28.26	32.98	37.04	43.51	48.22	55.15
c5h10cho-2	-14.71	105.13	32.92	41.23	48.51	54.84	64.98	72.35	82.82
nc4h9coch3	-66.75	99.91	35.14	43.65	51.09	57.59	68.15	76.07	88.06
c2h5coch3	-56.88	81.07	24.17	29.69	34.58	38.89	45.98	51.38	59.59
c4h8cho4-2	-7.13	93.87	28.32	35.24	41.23	46.38	54.58	60.57	69.42
c4h7cho1-4	-24.21	89.89	27.51	33.75	39.15	43.79	51.19	56.61	64.68
c4h6cho1-4	9.29	86.08	26.02	31.95	37.06	41.45	48.42	53.49	60.90
c4h6cho1-4	15.59	87.52	26.26	32.28	37.41	41.77	48.60	53.52	60.81
c4h7co1-4	12.69	91.01	26.69	32.32	37.19	41.38	48.04	52.90	60.09
c3h6cho-3	-9.63	79.79	23.58	28.85	33.43	37.39	43.73	48.40	55.34
c2h5chco	-24.37	77.60	23.04	28.23	32.54	36.11	41.56	45.40	51.31
ic5h11coc2	-30.23	119.67	45.68	56.67	66.15	74.31	87.34	96.96	111.54
ch2ch2coch	-7.88	85.86	23.40	28.31	32.66	36.50	42.82	47.64	54.95
ic4h9cho	-56.60	88.89	30.06	37.24	43.49	48.90	57.59	64.02	73.67
c2h3coch3	-30.52	76.83	21.21	26.41	30.81	34.54	40.46	44.92	53.28
ic4h9coch2	-26.68	94.51	34.63	43.09	50.32	56.49	66.24	73.35	84.07
ic4h9co	-19.70	90.01	29.22	35.81	41.53	46.48	54.43	60.28	68.99
c3h6cho-2	-3.08	86.60	23.28	28.03	32.30	36.10	42.42	47.24	54.35
ch3chcho	-5.56	70.38	13.99	19.16	23.77	27.85	34.61	39.73	46.16
ic8h17co	-41.43	114.58	51.09	65.10	76.88	86.75	101.89	112.47	127.80
nc7h15chco	-26.42	76.61	47.55	60.62	71.55	80.66	94.60	104.45	119.55
nc3h7chco	-6.70	38.92	25.60	32.96	39.05	44.08	51.63	56.78	64.31
ic3h7chco	-39.88	76.36	24.35	30.06	34.87	38.90	45.12	49.55	56.19
nc6h13chco	-21.49	67.19	41.79	53.57	63.35	71.43	83.68	92.24	105.43
ic8h17coch	-39.82	138.33	56.12	70.11	82.22	92.68	109.45	121.85	140.51
ic7h15coch	-34.89	128.91	50.62	63.13	73.98	83.35	98.39	109.51	126.25
ic6h13coch	-29.96	119.49	45.11	56.16	65.74	74.03	87.32	97.17	111.99
ic5h11coch	-25.03	110.07	39.58	49.17	57.50	64.70	76.26	84.82	97.69
ic3h7coch2	-21.28	85.28	28.03	35.45	41.75	47.07	55.36	61.29	70.03
ic8h17coc2	-45.02	147.93	62.19	77.60	90.88	102.31	120.55	134.01	154.43
ic6h13coc2	-35.16	129.09	51.18	63.64	74.39	83.64	98.41	109.31	125.85
ic6h13co	-29.56	108.85	40.21	49.75	58.02	65.15	76.57	84.97	97.54
ic4h9coc2h	-25.30	110.25	40.18	49.69	57.90	64.97	76.27	84.61	97.20
nc8h17coc3	-47.71	160.04	67.98	84.64	99.05	111.49	131.43	146.21	168.68
nc7h15coc3	-42.78	150.61	62.47	77.66	90.81	102.16	120.36	133.87	154.41
ic6h13coc3	-40.09	138.51	56.68	70.62	82.64	92.97	109.48	121.66	140.14
nc5h11coc3	-32.92	131.77	51.46	63.71	74.32	83.49	98.22	109.17	125.85
nc4h9coc3h	-27.99	122.35	45.97	56.74	66.07	74.15	87.15	96.83	111.60
ic5h11coc3	-35.16	129.09	51.18	63.64	74.39	83.64	98.41	109.31	125.85
nc3h7coc3h	-23.06	112.93	40.46	49.76	57.83	64.82	76.09	84.47	97.23
ic3h7coc3h	-24.83	110.44	39.32	49.11	57.55	64.81	76.40	84.95	97.89
ic8h17coc3	-49.95	157.36	67.70	84.57	99.12	111.64	131.62	146.36	168.70
ic7h15coc3	-45.02	147.93	62.19	77.60	90.88	102.31	120.55	134.01	154.43
nc6h13coc3	-37.85	141.19	56.97	70.69	82.56	92.83	109.29	121.52	140.13
ic4h9coc3h	-30.23	119.67	45.68	56.67	66.15	74.31	87.34	96.96	111.54
c8h17-2f	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
ch3chcoch3	-17.08	78.70	22.83	28.21	32.88	36.93	43.43	48.24	55.35
Ac12h23	-6.05	145.17	62.97	80.15	94.95	107.65	127.81	142.50	164.34
Ac11h21	-1.12	135.75	57.49	73.18	86.70	98.30	116.73	130.17	150.15
Ac10h19	3.81	126.33	52.01	66.21	78.44	88.96	105.66	117.84	135.96
ic5h11cho	-61.53	98.31	35.54	44.21	51.73	58.23	68.66	76.35	87.89
ic5h11co	-24.63	99.43	34.71	42.78	49.77	55.82	65.50	72.62	83.25
ic6h13cho	-66.47	107.73	41.05	51.19	59.98	67.57	79.73	88.70	102.19
c4h72-2	53.68	74.21	20.31	24.62	28.52	32.03	37.95	42.54	49.57
c7h132-4	15.40	97.23	35.19	44.83	53.18	60.40	71.95	80.46	93.21
c6h11-3	16.40	83.87	29.34	37.36	44.38	50.51	60.47	67.91	79.08
c7h13o2-4	-4.81	109.12	39.11	49.72	58.71	66.31	78.07	86.35	98.29
c8h18-2	-52.22	110.30	45.14	57.57	68.35	77.68	92.67	103.78	120.60
c8h17-2a	-3.22	113.72	44.37	56.19	66.43	75.29	89.51	100.03	115.94
c8h17-2g	-3.22	113.72	44.37	56.19	66.43	75.29	89.51	100.03	115.94
c8h17-2c	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-2d	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-2e	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-2f	-5.87	114.74	43.51	55.19	65.42	74.33	88.73	99.41	115.34
c8h17-2b	-7.82	115.54	44.29	55.16	64.87	73.51	87.83	98.74	115.20
c8h16-1-2	-23.35	109.43	43.17	54.53	64.35	72.82	86.37	96.37	111.56
c8h16-2-2	-26.29	108.60	42.88	54.08	63.82	72.27	85.88	96.00	111.36
c8h16-3-2	-24.59	108.16	41.73	53.50	63.63	72.31	86.12	96.26	111.68
c8h16-4-2	-24.84	108.16	41.72	53.48	63.60	72.29	86.13	96.31	111.74
c8h16-5-2	-25.01	107.78	42.08	53.58	63.54	72.15	85.94	96.14	111.58
c8h16-6-2	-22.07	108.61	42.34	54.02	64.07	72.71	86.44	96.53	111.78
c8h15-1-2	31.89	109.59	41.73	52.36	61.61	69.64	82.59	92.22	106.82
c8h17o-1-2	-36.06	119.48	47.27	59.72	70.45	79.67	94.36	105.11	121.17
c8h17o-2-2	-42.86	116.42	48.30	60.84	71.56	80.73	95.20	105.74	121.58
c8h17o-3-2	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17o-4-2	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17o-5-2	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17o-6-2	-40.43	117.49	47.71	60.43	71.31	80.59	95.21	105.84	121.76
c8h17o-7-2	-36.06	119.48	47.27	59.72	70.45	79.67	94.36	105.11	121.17
c8h17ooh-1	-73.42	128.56	53.57	66.58	77.81	87.47	102.87	114.18	131.24
c8h17oo-1-	-40.01	127.41	51.49	63.66	74.24	83.40	98.17	109.20	126.16
c8h17ooh-2	-79.41	124.10	54.48	67.60	78.80	88.34	103.37	114.33	131.15
c8h17oo-2-	-46.00	122.95	52.41	64.69	75.24	84.27	98.67	109.34	126.05
c8h17ooh-3	-76.88	125.76	53.71	66.96	78.30	87.98	103.27	114.41	131.30
c8h17oo-3-	-43.47	124.61	51.64	64.05	74.73	83.92	98.57	109.43	126.20
c8h17ooh-4	-76.88	125.76	53.71	66.96	78.30	87.98	103.27	114.41	131.30
c8h17oo-4-	-43.47	124.61	51.64	64.05	74.73	83.92	98.57	109.43	126.20
c8h17ooh-5	-76.88	125.76	53.71	66.96	78.30	87.98	103.27	114.41	131.30
c8h17oo-5-	-43.47	124.61	51.64	64.05	74.73	83.92	98.57	109.43	126.20
c8h17ooh-6	-76.88	125.76	53.71	66.96	78.30	87.98	103.27	114.41	131.30
c8h17oo-6-	-43.47	124.61	51.64	64.05	74.73	83.92	98.57	109.43	126.20
c8h17ooh-7	-73.42	128.56	53.57	66.58	77.81	87.47	102.87	114.18	131.24
c8h17oo-7-	-40.01	127.41	51.49	63.66	74.24	83.40	98.17	109.20	126.16
c8ooh1-2a	-24.41	131.98	52.78	65.19	75.88	85.08	99.71	110.44	126.60
c8ooh1-2b	-29.01	133.80	52.69	64.26	74.52	83.57	98.42	109.57	126.16
c8ooh1-2c	-27.06	133.00	51.79	64.18	74.91	84.18	98.97	109.74	125.61
c8ooh1-2d	-27.06	133.00	51.79	64.18	74.91	84.18	98.97	109.74	125.61

c8ooh1-2e	-27.06	133.00	51.79	64.18	74.91	84.18	98.97	109.74	125.61
c8ooh2-2a	-30.40	127.52	53.69	66.22	76.89	85.95	100.21	110.59	126.50
c8ooh2-2c	-33.05	128.54	52.72	65.21	75.91	85.05	99.46	109.90	125.53
c8ooh2-2d	-33.05	128.54	52.72	65.21	75.91	85.05	99.46	109.90	125.53
c8ooh2-2e	-33.05	128.54	52.72	65.21	75.91	85.05	99.46	109.90	125.53
c8ooh2-2f	-33.05	128.54	52.72	65.21	75.91	85.05	99.46	109.90	125.53
c8ooh3-2a	-27.87	129.18	52.92	65.57	76.38	85.59	100.11	110.67	126.66
c8ooh3-2b	-32.47	131.00	52.84	64.56	74.84	83.83	98.45	109.39	125.90
c8ooh3-2d	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh3-2e	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh3-2f	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh3-2g	-27.87	129.18	52.92	65.57	76.38	85.59	100.11	110.67	126.66
c8ooh4-2a	-27.87	129.18	52.92	65.57	76.38	85.59	100.11	110.67	126.66
c8ooh4-2b	-32.47	131.00	52.84	64.56	74.84	83.83	98.45	109.39	125.90
c8ooh4-2c	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh4-2e	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh4-2f	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh4-2g	-27.87	129.18	52.92	65.57	76.38	85.59	100.11	110.67	126.66
c8ooh5-2a	-27.87	129.18	52.92	65.57	76.38	85.59	100.11	110.67	126.66
c8ooh5-2b	-32.47	131.00	52.84	64.56	74.84	83.83	98.45	109.39	125.90
c8ooh5-2c	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh5-2d	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh5-2f	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh5-2g	-27.87	129.18	52.92	65.57	76.38	85.59	100.11	110.67	126.66
c8ooh6-2b	-32.47	131.00	52.84	64.56	74.84	83.83	98.45	109.39	125.90
c8ooh6-2c	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh6-2d	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh6-2e	-30.52	130.20	51.93	64.55	75.40	84.70	99.37	109.98	125.65
c8ooh6-2g	-27.87	129.18	52.92	65.57	76.38	85.59	100.11	110.67	126.66
c8ooh7-2c	-27.06	133.00	51.79	64.18	74.91	84.18	98.97	109.74	125.61
c8ooh7-2d	-27.06	133.00	51.79	64.18	74.91	84.18	98.97	109.74	125.61
c8ooh7-2e	-27.06	133.00	51.79	64.18	74.91	84.18	98.97	109.74	125.61
c8ooh7-2f	-27.06	133.00	51.79	64.18	74.91	84.18	98.97	109.74	125.61
c8ooh1-oo1	-61.20	145.68	59.43	72.55	83.97	93.85	109.65	121.16	137.77
c8ooh1-oo2	-67.20	141.21	60.40	73.71	85.17	94.98	110.49	121.69	137.96
c8ooh2-oo1	-67.20	141.21	60.40	73.71	85.17	94.98	110.49	121.69	137.96
c8ooh1-oo3	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh3-oo1	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh1-oo4	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh4-oo1	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh1-oo5	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh5-oo1	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh3-oo7	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh7-oo3	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh4-oo7	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh7-oo4	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh5-oo7	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh7-oo5	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh6-oo7	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh7-oo6	-64.66	142.87	59.63	72.98	84.50	94.40	110.09	121.43	137.86
c8ooh2-oo3	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh3-oo2	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh2-oo4	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh4-oo2	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh2-oo5	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh5-oo2	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh2-oo6	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh6-oo2	-70.66	138.41	60.63	74.12	85.64	95.44	110.79	121.78	137.91
c8ooh3-oo4	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh4-oo3	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh3-oo5	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh5-oo3	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh3-oo6	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh6-oo3	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh4-oo5	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh5-oo4	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh4-oo6	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh6-oo4	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh5-oo6	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8ooh6-oo5	-68.13	140.07	59.82	73.40	85.03	94.95	110.54	121.72	137.97
c8h16o1-1-	-46.13	110.68	42.06	55.07	66.22	75.74	90.76	101.61	117.70
c8h16o1-2-	-51.19	111.51	45.12	57.78	68.55	77.68	91.98	102.30	117.77
c8h16o1-3-	-50.50	111.42	42.70	55.82	67.00	76.51	91.40	102.13	118.09
c8h16o1-4-	-70.54	109.39	40.86	54.43	65.98	75.79	91.15	102.18	118.54
c8h16o1-5-	-74.80	100.05	40.77	54.64	66.48	76.54	92.28	103.55	120.02
c8h16o2-3-	-55.56	109.52	45.49	58.48	69.42	78.60	92.80	102.95	118.27
c8h16o2-4-	-57.30	106.99	43.45	56.85	68.14	77.63	92.33	102.83	118.60
c8h16o2-5-	-77.34	104.96	41.86	55.53	67.09	76.84	91.98	102.80	118.93
c8h16o2-6-	-81.60	95.62	41.77	55.75	67.59	77.59	93.11	104.17	120.40
c8h16o3-4-	-53.13	111.96	44.82	58.00	69.12	78.47	92.93	103.21	118.44
c8h16o3-5-	-54.87	109.43	42.89	56.60	68.11	77.74	92.57	103.10	118.90
c8h16o3-6-	-74.91	107.40	41.00	55.16	67.05	77.00	92.30	103.14	119.34
c8h16o3-7-	-74.80	98.68	40.77	54.64	66.48	76.54	92.28	103.55	120.02
c8h16o4-5-	-53.13	111.96	44.82	58.00	69.12	78.47	92.93	103.21	118.44
c8h16o4-6-	-54.87	109.43	42.89	56.60	68.11	77.74	92.57	103.10	118.90
c8h16o4-7-	-70.54	108.02	40.86	54.43	65.98	75.79	91.15	102.18	118.54
c8h16o5-6-	-53.13	111.96	44.82	58.00	69.12	78.47	92.93	103.21	118.44
c8h16o5-7-	-50.50	110.05	42.70	55.82	67.00	76.51	91.40	102.13	118.09
c8h16o6-7-	-48.76	112.58	44.52	57.33	68.22	77.45	91.88	102.27	117.82
c8ket1-1-2	-92.12	136.98	53.95	66.61	77.50	86.83	101.57	112.23	127.85
c8ket1-2-2	-96.33	132.53	55.26	68.14	79.07	88.32	102.72	112.99	128.17
c8ket1-3-2	-95.58	134.17	54.05	66.87	77.78	87.05	101.57	112.03	127.62
c8ket1-4-2	-95.58	134.17	54.05	66.87	77.78	87.05	101.57	112.03	127.62
c8ket1-5-2	-95.58	134.17	54.05	66.87	77.78	87.05	101.57	112.03	127.62
c8ket7-3-2	-95.58	134.17	54.05	66.87	77.78	87.05	101.57	112.03	127.62
c8ket7-4-2	-95.58	134.17	54.05	66.87	77.78	87.05	101.57	112.03	127.62
c8ket7-5-2	-95.58	134.17	54.05	66.87	77.78	87.05	101.57	112.03	127.62
c8ket7-6-2	-95.58	134.17	54.05	66.87	77.78	87.05	101.57	112.03	127.62
c8ket3-1-2	-99.96	136.07	53.95	66.45	77.16	86.33	100.84	111.43	127.38
c8ket4-1-2	-99.96	136.07	53.95	66.45	77.16	86.33	100.84	111.43	127.38
c8ket5-1-2	-99.96	136.07	53.95	66.45	77.16	86.33	100.84	111.43	127.38
c8ket3-7-2	-99.96	136.07	53.95	66.45	77.16	86.33	100.84	111.43	127.38
c8ket4-7-2	-99.96	136.07	53.95	66.45	77.16	86.33	100.84	111.43	127.38
c8ket5-7-2	-99.96	136.07	53.95	66.45	77.16	86.33	100.84	111.43	127.38
c8ket6-7-2	-99.96	136.07	53.95	66.45	77.16	86.33	100.84	111.43	127.38
c8ket3-4-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket3-5-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket3-6-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket4-3-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket4-5-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket4-6-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket5-3-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket5-4-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket5-6-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07

c8ket6-3-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket6-4-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket6-5-2	-101.20	130.82	53.48	67.00	78.35	87.84	102.42	112.72	128.07
c8ket3-2-2	-106.15	129.87	55.16	67.54	78.09	87.07	101.18	111.45	127.14
c8ket4-2-2	-106.15	129.87	55.16	67.54	78.09	87.07	101.18	111.45	127.14
c8ket5-2-2	-106.15	129.87	55.16	67.54	78.09	87.07	101.18	111.45	127.14
c8ket6-2-2	-106.15	129.87	55.16	67.54	78.09	87.07	101.18	111.45	127.14
c7h15-2f	1.71	104.30	38.85	49.21	58.19	65.97	78.46	87.72	101.76
c7h14-5-2	-17.14	99.19	36.84	47.05	55.83	63.38	75.38	84.21	97.60
c7h13-1-2	37.24	100.55	35.89	45.29	53.42	60.44	71.69	80.02	92.73
ic3h7coch2	-21.28	85.28	28.03	35.45	41.75	47.07	55.36	61.29	70.03
ic3h7coc2h	-19.90	101.02	33.81	42.13	49.30	55.47	65.33	72.61	83.63
ic3h7coc3h	-24.83	110.44	39.32	49.11	57.55	64.81	76.40	84.95	97.89
ic4h9coc2h	-25.30	110.25	40.18	49.69	57.90	64.97	76.27	84.61	97.20
ic3h7coc2h	-42.42	93.35	31.66	40.18	47.40	53.51	63.03	69.86	80.01
ic3h7chco	-39.88	76.36	24.35	30.06	34.87	38.90	45.12	49.55	56.19
ic3h6coc2h	6.58	96.77	30.88	38.80	45.49	51.13	59.87	66.11	75.35
tc3h6coc2h	1.78	97.22	30.74	37.81	44.05	49.52	58.42	65.06	74.79

Florent KARSENTY

Etude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de carburants aéronautiques alternatifs synthétiques et de mélanges-modèles

Les carburants liquides actuels sont principalement issus du raffinage du pétrole. Cependant, leur remplacement par des carburants de nouvelle génération, renouvelables, dérivant de la biomasse et plus propre apparait comme une nécessité économique et environnementale. Les buts sont de réduire la dépendance au pétrole dont le prix augmente et les réserves diminuent, et limiter les émissions de dioxyde de carbone (gaz à effet de serre). L'adaptation des motorisations actuelles à ces nouveaux carburants nécessite une connaissance approfondie de leur cinétique de combustion et de la nature et des concentrations des polluants formés lors de leur utilisation. Les activités de recherche sur les carburants alternatifs destinés au secteur aéronautique ont ainsi considérablement augmenté ces dernières années. Dans le cadre de cette étude nous nous sommes intéressés à la solution « carburants de synthèse » qui offrent des perspectives encourageantes pour le futur. Des études cinétiques d'oxydation ont été menées en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) sur une large gamme de conditions expérimentales à l'Institut de Combustion Aérothermique Réactivité et Environnement sur le campus du CNRS d'Orléans. Ces études ont été menées dans un premier temps sur des hydrocarbures purs qui pourraient être de bons candidats comme molécules-modèles pour représenter la part des iso-paraffines dans un kérosène de synthèse. Ces molécules sont des isomères de l'iso-octane utilisé comme tel jusqu'à maintenant. Dans un second temps, des études ont été menées sur trois kérosènes de synthèse dont un SPK fournit par l'IFP, un CtL (Sasol) et un GtL (Shell). Les analyses par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) et par chromatographie en phase gazeuse (CPG-FID-TCD-MS) nous ont permis de mesurer les profils de concentration des réactifs, des produits finals et des intermédiaires stables en fonction de la température. Des mécanismes cinétiques détaillés adaptés aux composés étudiés ont été développés et validés par confrontation avec les résultats expérimentaux.

Mots clés : cinétique, oxydation, kérosène, kérosène de synthèse, Fischer-Tropsch, réacteur auto-agité, IRTF, CPG, combustion, modélisation

Experimental and kinetic modeling study of combustion of aeronautical alternative synthetic fuels and model mixtures

Current liquid fuels are mainly from petroleum refining. However, replacing them with new-generation alternatives fuels, renewable, from biomass and cleaner appear to be an economic and environmental necessity. Goals are to reduce petroleum dependency whose price increases and supplies decreases, and limit emissions of carbon dioxide (greenhouse gas emissions). The adaptation of existing engines to these new fuels requires a thorough knowledge of their kinetic of combustion and the nature and concentrations of pollutants formed during their use. Research activities on alternative fuels for the aviation industry have considerably increased in recent years. In this study we are interested in the "synthetic fuels" solution that offers encouraging prospects for the future. Studies on the kinetic of oxidation were carried out in a Jet Stirred Reactor (JSR) over a wide range of experimental conditions at the Institute of Combustion Aerothermal Reactivity and Environment on the campus of the CNRS of Orléans. These studies were initially conducted on pure hydrocarbons which could be good candidates as models molecules to represent the iso-paraffins cut in a synthetic kerosene. These molecules are isomers of iso-octane used as such until now. In a second step, studies were conducted on three synthetic kerosene, a SPK provided by IFP, a CtL (Sasol) and GTL (Shell). Analyses by Fourier transform infrared spectrometry (FTIR) and by gas chromatography (GC-FID-TCD-MS) allowed us to measure the concentration profiles of reactants, stable intermediates and finals products as a function of temperature. Detailed kinetic mechanisms adapted to the studied compounds have been developed and validated by comparison with experimental results.

Keywords: kinetic, oxidation, kerosene, synthetic kerosene, Fischer-Tropsch, Jet stirred reactor, FTIR GC, combustion, modeling

cnrs
dépasser les frontières

Institut de Combustion Aérothermique
Réactivité et Environnement
1 C, Avenue de la Recherche
Scientifique 45071 Orléans Cedex 2

Orléans ICARE